

TRABAJO FINAL DE MÁSTER

Máster en Ingeniería Química

**ANÁLISIS DE MODELOS COMPUTACIONALES PARA EL
ESTUDIO DE TANQUES AFECTADOS POR UN INCENDIO**



Memoria y Anexos

Autor:	David Andrés Lahoz
Directora:	Elsa Pastor Ferrer
Co-Directora:	Alba Àgueda Costafreda
Convocatoria:	Octubre 2019

Resum

Les instal·lacions de tancs de gas líquat de propà (GLP) per ús domèstic i/o comercial a petita escala són molt comuns en interfícies urbano-forestals (IUF). Aquest tipus d'instal·lacions presenten un perill per la població i/o edificacions, donat que contenen material inflamable i es troben a llocs on pot haver-hi vegetació al voltant del dipòsit. Per això, aquest tipus de tancs es poden veure afectats per les flames en el cas d'incendi forestal, augmentant les possibles conseqüències ambientals, econòmiques i socials dels incendis.

En aquest treball es realitza una revisió bibliogràfica dels assajos experimentals i dels models computacionals que s'han desenvolupat fins l'actualitat per l'estudi del comportament de tancs de GLP afectats per un incendi. Posteriorment es porta a terme la implementació d'un model simplificat de tipus "model de zones" fent servir el codi de programació de MATLAB. A partir d'algunes dades experimentals recollides a la literatura, es valida el model computacional per comprovar quant s'adapta a la realitat. A més a més, es realitza un estudi de sensibilitat del model per observar quines variables poden tenir un efecte més preponderant sobre els resultats matemàtics.

El model computacional implementat és capaç de reproduir el comportament del propà dins del dipòsit quan aquest rep un flux de calor uniforme i constant en tot el seu volum. En el procés de validació s'observa una dependència del volum del dipòsit pel correcte funcionament del model; les corbes de pressurització per a un tanc de 5 tones presenten una millor adaptació en comparació amb els resultats obtinguts per a un dipòsit d'1 tona. L'anàlisi de sensibilitat confirma que amb un temps d'iteració de 0,1 s, el model compila correctament, sense presentar pics en els resultats i, també, s'observa la gran importància que té el líquid dins del model.

Resumen

Las instalaciones de tanques de gas licuado de propano (GLP) para uso doméstico y/o comercial a pequeña escala son muy comunes en interfaces urbano-forestales (IUF). Este tipo de instalaciones presentan un cierto peligro para la población y/o edificaciones, dado que contienen material inflamable y se encuentran en lugares en los que puede haber vegetación alrededor del depósito. Por ello, este tipo de tanques podrían verse afectados por las llamas en caso de incendio forestal, aumentando las posibles consecuencias ambientales, económicas y sociales de los incendios.

En este trabajo se realiza una revisión bibliográfica de los ensayos experimentales y los modelos computacionales que se han desarrollado hasta la fecha para el estudio del comportamiento de tanques de GLP afectados por un incendio. Posteriormente se lleva a cabo la implementación de un modelo sencillo del tipo “modelo de zonas” usando el código de programación de MATLAB. A partir de algunos datos experimentales recogidos en la literatura, se valida el modelo computacional para comprobar cuánto se adapta a la realidad. Además, se realiza un estudio de sensibilidad del modelo para observar qué variables pueden tener un efecto más preponderante sobre los resultados matemáticos.

El modelo computacional implementado es capaz de reproducir el comportamiento del propano dentro del depósito cuando éste recibe un flujo de calor uniforme y constante en todo su volumen. En la validación se observa una dependencia del volumen del depósito para el correcto funcionamiento del modelo; las curvas de presurización para un tanque de 5 toneladas presentan una mejor adaptación en comparación con los resultados obtenidos para un depósito de 1 tonelada. El análisis de sensibilidad confirma que, con un tiempo de iteración de 0,1 s, el modelo compila de forma correcta, sin picos en sus resultados. También se observa la gran importancia que tiene el líquido dentro del modelo.

Abstract

Domestic and small-scale commercial liquified petroleum gas (LPG) storage tanks are present in wildland-urban interface (WUI). This type of infrastructure involves a certain hazard for population and buildings, as tanks contain flammable material and, very frequently are surrounded by vegetation. Therefore, this type of tanks could be affected by the flames in case of a forest fire, increasing environmental, economic and social consequences of the fires.

A bibliographic review of experimental tests and computational models for the study of the behaviour of LPG tanks affected by fire is carried out. Subsequently, the implementation of a simplified model based on “lumped models” type is carried out using MATLAB as programming code. Based on some experimental data collected from the literature, the computational model is validated to verify how much it reflects to reality. In addition, a sensitivity analysis of the model is performed to show which variables can affect more importantly the results derived from the computational model.

The implemented computational model is capable of reproducing the effect on propane inside the vessel when it receives, on the totality of his volume, a uniform and constant heat flow by fire. The validation shows volume dependence on model for proper functioning. A 5 tonnes vessel adapts better than a vessel of 1 tonne. The sensitivity analysis confirms that a time step of 0.1 s is valid enough for simulation. Also, the great importance of the liquid within the model is observed.



Agradecimientos

Quiero agradecer a todo el personal del CERTEC la oportunidad que me han dado de colaborar con el grupo, todo el soporte recibido y todo lo que he podido aprender de ellos y de ellas. Sin olvidarme de Giordano, gracias por tu ilusión y la paciencia que has tenido para enseñarme.

También quiero transmitir mi gratitud al Institut d'Estudis Catalans por su colaboración durante mi etapa en el CERTEC.

Glosario

$A_{L_{av}}$	Superficie promedio del líquido [m ²]
$A_{L_{ext}}$	Superficie pared externa en contacto con el líquido [m ²]
$A_{L_{int}}$	Superficie pared interna en contacto con el líquido [m ²]
A_{LV}	Superficie interfase líquido-vapor [m ²]
A_{PRV}	Área de salida de la PRV [m ²]
$AL0$	Sección del líquido inicial [m ²]
$A_{V_{av}}$	Superficie promedio del vapor [m ²]
$A_{V_{ext}}$	Superficie pared externa en contacto con el vapor [m ²]
$A_{V_{int}}$	Superficie pared interna en contacto con el vapor [m ²]
c	Constante de la ecuación de Nusselt, adimensional
C_D	Coeficiente de descarga, adimensional
CDF	Computational Fluid Dynamics
Cp_L	Capacidad calorífica del líquido a presión constante [J/kg·K]
Cp_s	Capacidad calorífica del acero [J/kg·K]
Cp_V	Capacidad calorífica del vapor a presión constante [J/kg·K]
FE	Full Engulfment
Fi	Caudal de salida de PRV [kg/s]
F_{w_L}	Factor vista entre la pared en contacto con el vapor y la superficie de líquido, adimensional
g	Aceleración de la gravedad [m/s ²]
Gr	Número de Grashof
h_{CN}	Coeficiente de convección del fluido [W/m ² ·K]

h_f	Coeficiente de convección de la llama [W/m ² ·K]
h_L	Coeficiente de convección del líquido [W/m ² ·K]
h_{LV}	Coeficiente de convección en la interfase líquido-vapor [W/m ² ·K]
H_V	Entalpía específica de la fase vapor [J/kg]
h_V	Coeficiente de convección del vapor [W/m ² ·K]
jt	Espesor capa exterior discretizada [m]
k_L	Conductividad térmica del líquido [W/m·K]
k_S	Conductividad térmica del acero [W/m·K]
k_V	Conductividad térmica del vapor [W/m·K]
L	Nivel del líquido [m]
L_0	Nivel inicial del líquido [m]
L_c	Longitud característica [m]
L_i	Nivel inicial del líquido [m]
LP	Lumped Model
M	Masa molecular [g/mol]
m_L	Masa del líquido [kg]
m_V	Masa del vapor [kg]
n	Constante de la ecuación de Nusselt, adimensional
Nu	Número de Nusselt
P	Presión [Pa]
P_{crit}	Presión crítica [Pa]
PE	Partial Enfulgment

JF	Jet-Fire
P_{in}	Presión en el interior del tanque [Pa]
P_{ext}	Presión exterior [Pa]
Pr	Número de Prandtl
PRV	Válvula de alivio de presión (del inglés, <i>Pressure Relief Valve</i>)
q_{in}	Flujo incidente [kW/m ²]
q_L	Caudal convectivo líquido [kW]
q_{LV}	Caudal convectivo líquido-vapor [kW]
q_{PRV}	Caudal convectivo PRV [kW]
q_{rad}	Caudal térmico por radiación [kW]
q_s	Caudal por conducción a través de la pared [kW]
q_v	Caudal convectivo vapor [kW]
R	Constante de los gases ideales
R_e	Radio exterior [m]
R_i	Radio interior [m]
Ss	Espesor [m]
st	Espesor capa interior discretizada [m]
T_{amb}	Temperatura ambiente [K]
T_{boil}	Temperatura de ebullición [K]
T_f	Temperatura de la llama [K]
T_L	Temperatura del líquido [K]
T_{SL}	Temperatura nodo SL [K]

T_{SSL}	Temperatura nodo SSL [K]
T_{SV}	Temperatura nodo SV [K]
T_{SSV}	Temperatura nodo SSV [K]
T_V	Temperatura del vapor [K]
Z	Factor de compresibilidad, adimensional

Letras griegas

β	Beta (ec. 30)
γ	Gamma (ec. 2)
ε	Emisividad propano
ε_s	Emisividad acero AISI 304
ε_f	Emisividad de la llama
λ_{ev}	Calor latente de vaporización
μ_L	Viscosidad del líquido [Pa·s]
μ_V	Viscosidad del vapor [Pa·s]
ρ_L	Densidad del líquido [kg/m ³]
ρ_V	Densidad del vapor [kg/m ³]
σ	Límite elástico [MPa]
σ_{sup}	Tensión superficial [N/m]

Índice

RESUM	I
RESUMEN	II
ABSTRACT	III
AGRADECIMIENTOS	V
GLOSARIO	VI
1. INTRODUCCIÓN	13
1.1. Contexto del proyecto	14
1.2. Objetivos del proyecto.....	15
1.3. Alcance del proyecto.....	15
2. ESTADO DEL ARTE	17
2.1. Ensayos experimentales	17
2.2. Modelos computacionales.....	19
3. MODELO COMPUTACIONAL	25
3.1. Modelo físico-termodinámico	25
3.1.1. Flujos y caudales térmicos.....	25
3.1.2. Presión	26
3.1.3. Válvula de alivio de presión (PRV).....	26
3.1.4. Caudal de evaporación	28
3.1.5. Nivel del tanque.....	28
3.1.6. Fenómeno de estratificación.....	29
3.2. Implementación del modelo computacional	30
3.2.1. Discretización del tanque	30
3.2.2. Sistema de ecuaciones	32
3.2.3. Hipótesis y simplificaciones.....	33
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	37
4.1. Validez experimental	37
4.2. Análisis de sensibilidad	49
CONCLUSIONES	54
ANÁLISIS DEL IMPACTO AMBIENTAL	55

PRESUPUESTO Y/O ANÁLISIS ECONÓMICO	56
BIBLIOGRAFÍA	59
ANEXO A	63
ANEXO B	70
ANEXO C	72

1. Introducción

Actualmente existe una gran preocupación por la continua presencia de incendios en interfaces urbano-forestales (IUF), dado que este tipo de accidentes pueden causar la pérdida de vidas humanas y, al mismo tiempo, presentar consecuencias ambientales, sociales y económicas elevadas. Un aumento de este tipo de accidentes podría ser debido a las consecuencias del cambio climático, que sufre todo el planeta, ya que el aumento de temperaturas afecta directamente a la vegetación de los bosques. Sin obviar la contribución del clima actual, la aparición de este tipo de accidentes se debe a fenómenos naturales o a la falta de información e implicación por parte de la sociedad, la cual interactúa a través de la IUF.

En este tipo de zonas (i.e. IUF) el incendio puede llegar a afectar instalaciones y/o edificios que, a su vez, están habitados por personas. Un elemento a tener en cuenta, cuando se da el escenario citado, son los depósitos de almacenaje de combustible, más concretamente, depósitos de gas licuado de propano (GLP) que suministran viviendas, e incluso, urbanizaciones. Estas instalaciones pueden encontrarse en riesgo de incendio y explosión, dando lugar a una situación de BLEVE - bola de fuego.

En la Figura 1.1 se muestran imágenes reales de tanques de GLP involucrados en incendios forestales a nivel nacional (Benitatxell – Comunidad Valenciana, 2016) y mundial (Calabassas – California, 2016). En la imagen de la izquierda se diferencian dos focos de fuego: el dardo de fuego que proviene del depósito de GLP y el incendio de la vegetación que hay alrededor de la edificación. La imagen de la derecha muestra el estado en que queda un depósito rodeado de vegetación cuando ésta entra en ignición por un incendio forestal.



Figura 1.1. Izquierda: Incendio en Calabassas (California, 2016); derecha: Benitatxell (Comunidad Valenciana, 2016).

Dentro de la comunidad científica, existen diferentes ramas que trabajan en la prevención y generación de herramientas para la lucha contra incendios forestales. Debido a las grandes consecuencias que

puede llegar a tener un accidente que implique un depósito de GLP, se estudia el comportamiento dinámico del fluido contenido en este tipo de depósitos. Esto se lleva a cabo mediante herramientas computacionales ya que, según el modelo planteado, la cantidad de información que se necesita procesar para llevar a cabo los cálculos es elevada.

1.1. Contexto del proyecto

Este trabajo enfoca sus esfuerzos en estudiar el escenario de la Figura 1.2, i.e. un depósito de GLP rodeado totalmente por un incendio. En la Figura 1.2a se observa un caso real experimental; la esquematización conceptual del incendio y del tanque queda representada en la Figura 1.2.b. El escenario mostrado en esta figura se clasifica como “full engulfment” (en inglés), y hace referencia a un tanque rodeado completamente por llamas.

Además del escenario mostrado en la Figura 1.2. (“full engulfment”), existen otros escenarios de incendio que pueden afectar a un tanque. Por ejemplo, las llamas del incendio pueden estar en contacto directo con el tanque de forma parcial. Otro escenario posible se da cuando el tanque puede verse afectado por la radiación de un incendio, es decir, las llamas no tocan la pared del tanque, pero el incendio sí que afecta la temperatura de las paredes.

Independientemente del tipo de escenario de fuego, el flujo de calor emitido por las llamas hace aumentar la temperatura de la pared exterior del tanque, debido al transporte de energía como combinación de los fenómenos de radiación y convección. La contribución relativa de cada fenómeno de transferencia de calor variará según el tipo de escenario de fuego.

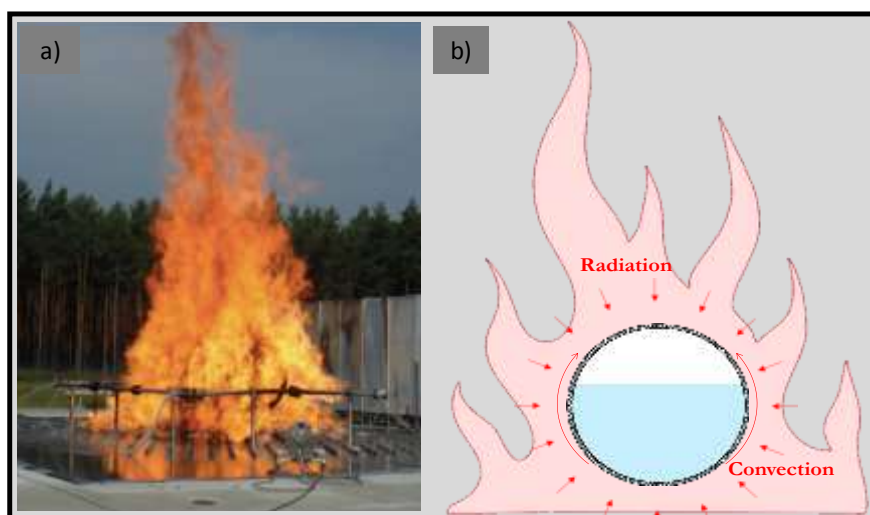


Figura 1.2. Tanque de GLP rodeado de fuego (“full engulfment”): a) Caso experimental; b) Esquema conceptual (Scarponi, 2018)

El aumento de la temperatura en la pared exterior del tanque provoca un aumento de la temperatura en el volumen ocupado por el líquido y el vapor, traduciéndose en un aumento de la presión. La presurización del sistema viene dada por el aumento del valor de presión de saturación del líquido, dado su aumento de temperatura.

Si la presión interna alcanza el valor de la presión de seguridad de la válvula de alivio (PRV, del inglés “pressure relief valve”), caracterizado por el fabricante del depósito, la válvula se activa permitiendo la salida de parte del fluido con el objetivo de disminuir la presión del depósito.

La zona del líquido se calentará de forma rápida, ya que el coeficiente de convección en la superficie interna del tanque en contacto con el líquido tendrá un valor elevado y dependiendo del flujo de calor que exista entre la pared y el líquido, se alcanzará un equilibrio térmico, Bubbico et al. (2017).

En el caso del vapor, debido a su bajo coeficiente de convección y ser un mal transmisor de calor, la pared del vapor alcanzará altas temperaturas, pudiéndose dar situaciones de riesgo para la integridad mecánica del tanque.

Más adelante se explicarán con mayor detalle todos los fenómenos presentes durante la presurización del tanque debido a la presencia de un incendio que lo rodea completamente.

1.2. Objetivos del proyecto

Este proyecto pretende poner en funcionamiento un modelo computacional simplificado para el estudio del comportamiento termodinámico del fluido contenido en el interior de tanques de GLP afectados totalmente por un incendio. Para ello se han establecido los siguientes objetivos específicos:

1. Revisar la bibliografía existente en relación a los estudios experimentales y los modelos computacionales desarrollados para el estudio del comportamiento de tanques de GLP afectados por un incendio.
2. Implementar un modelo computacional a partir de la información recopilada en la revisión bibliográfica.
3. Validar el modelo computacional para comprobar que reproduce la realidad.
4. Establecer el alcance del modelo, es decir, qué rango de valores son aptos para determinadas variables de entrada para que el modelo funcione de forma correcta a nivel matemático.

1.3. Alcance del proyecto

Para implementar el modelo objeto de este trabajo es necesario conocer y definir todas las variables presentes en el sistema “incendio-depósito GLP”. La revisión bibliográfica inicial es importante porque

permite determinar: i) qué tipo de escenarios de fuego se han estudiado; ii) cuáles eran las dimensiones y el volumen inicial de los tanques considerados, y sus condiciones iniciales de temperatura y presión; iii) cuáles eran las propiedades físico-térmicas de los materiales presentes. Para la recopilación de información sobre los modelos computacionales desarrollados con tanques de GLP afectados por un incendio se ha consultado bibliografía diversa, e.g. Landucci et al. (2016), Scarponi et al. (2016), Bubbico et al. (2017).

Se ha implementado el modelo descrito por Landucci et al. (2016). Este modelo se ha seleccionado a partir de la revisión bibliográfica por su discretización del dominio y las consideraciones tenidas en cuenta para el cálculo de la presión. Para la implementación computacional del modelo seleccionado se ha utilizado el programa MATLAB 2018.

El modelo implementado se ha validado comparando la evolución de la presión en el interior del tanque calculada con la registrada en ensayos experimentales realizados en los años 80 (Moodie et al., 1982, 1988). También se han comparado los tiempos calculados de apertura de la válvula de alivio con los experimentales y, en los casos en que se disponía de datos, con los calculados por otros autores con un modelo parecido (Zinnamosca, 2002). Este otro modelo es también un modelo de zonas simplificado, en el cual el valor de la presión depende únicamente del líquido y considera que hay transferencia de calor entre las paredes del líquido y del vapor por la diferencia de temperaturas. El análisis de sensibilidad se ha realizado planteando un diseño factorial con tres niveles para dos variables de entrada: intervalo de tiempo de cálculo y nivel de llenado.

2. Estado del arte

En la década de los 70 el GLP obtuvo una gran presencia a nivel industrial como fuente de energía, debido a su precio y su gran capacidad calorífica. El hecho de trabajar con un combustible presurizado dentro de un tanque, presenta un cierto riesgo para las personas e infraestructuras de alrededor, lo que llevó a que diferentes instituciones y asociaciones investigaran y trabajaran en la seguridad contra incendios para tanques de GLP.

Instituciones americanas como la Asociación Americana de Ferrocarriles (American Association of Railroads, AAR) o el Departamento de Transporte (US Department of Transport, DOT) fueron las primeras en realizar ensayos experimentales para medir la respuesta al fuego de diferentes depósitos de GLP. Al mismo tiempo, empezaron a postularse diferentes modelos computacionales, con el objetivo de resolver el comportamiento del fluido en el interior del tanque cuando se ve afectado por un flujo de calor que proviene de un incendio. En los siguientes apartados se exponen los ensayos experimentales y las publicaciones de modelos computacionales en el ámbito de la protección de depósitos GLP.

2.1. Ensayos experimentales

La Tabla 2.1 recoge los trabajos más relevantes en el ámbito de la experimentación con depósitos de GLP. En esta tabla se indica el volumen de los depósitos estudiados.

Según la Tabla 2.1., en los dos primeros estudios se trataron volúmenes elevados dado que estos ensayos fueron realizados con tanques de GLP para el transporte. A partir del trabajo de Moodie et al. (1982) y hasta Landucci et al. (2009), los volúmenes de los depósitos corresponden más con el enfoque de este trabajo, es decir, con volúmenes similares a los de los tanques comerciales que se encuentran en la IUF.

Moodie et al. (1982, 1988) reportan ensayos con diferentes tanques y diferente nivel de llenado. Ensayos experimentales más actuales han sido llevados a cabo por Birk et al. (2006), estudiando la transición a la BLEVE y la importancia de los defectos en los materiales para la protección térmica del tanque. Landucci et al. (2009) también experimentaron con tanques de GLP para investigar la efectividad de la protección térmica en los depósitos.

Tabla 2.1. Ensayos experimentales en tanques cilíndricos de GLP con fuego (adaptada de Scarponi (2018)).

Referencia	Volumen del depósito
Manda (1973)	140 m ³
Anderson et al. (1974)	125 m ³
Moodie et al. (1982)	Variable*
Moodie et al. (1988)	Variable*
Birk et. al. (2006)	1,8 m ³
Birk et. al. (2006)	1,9 m ³
Landucci et al. (2009)	3 m ³

* Véase Tabla 2.2.

El trabajo de Moodie et al. (1982, 1988) contiene ensayos experimentales muy completos y, además, se adaptan al interés del proyecto, ya que el volumen de los tanques es parecido a los comerciales presentes en zonas IUF. Estos autores utilizaron un espacio de 4 metros de longitud y 2,4 metros de anchura para introducir queroseno como material combustible. Dado que el objetivo de los investigadores era llegar a 30 minutos de incendio, se introducían hasta 120 mm de profundidad de material combustible dentro de la estructura. Este charco, una vez incendiado, generaba un fuego de charco que rodeaba el tanque por completo, pudiéndose considerar un flujo de calor constante y uniforme para toda la pared exterior del tanque.

La Tabla 2.2 resume el conjunto de experimentos realizados por Moodie et al. (1982, 1988). Como se puede observar, en esta tabla se define el escenario del tanque (longitud, diámetro y espesor) y sus condiciones iniciales (nivel de llenado y presión inicial).

Tabla 2.2. Dimensiones y condiciones iniciales de los tanques de los ensayos realizados por Moodie et al. (1982 y 1988)

Capacidad masa de propano [ton]	Volumen [m ³]	Diámetro tanque [m]	Longitud tanque [m]	Espesor tanque [mm]	Nivel llenado [%]	Presión inicial tanque [bar]
0,25	0,5	0,51	2,26	5	40	6,6
1	2	1,00	2,9	6	20	5,1
					40	5,1
					80	7,1
5	10	1,70	4,88	11,85	22	5,5
					36	5,2
					38*	5,6
					58	5,5
					72	5,8

*Ensayo abortado por problemas con la instrumentación. Datos experimentales limitados para este ensayo.

2.2. Modelos computacionales

Este apartado pretende hacer un recorrido bibliográfico sobre diferentes modelos computacionales publicados que tratan de desarrollar el comportamiento dinámico del GLP en tanques afectados por un incendio. Al mismo tiempo, conocer las conclusiones obtenidas con estos modelos existentes ayuda a entender y justificar la implementación del modelo de este trabajo.

La Tabla 2.3 recoge los modelos computacionales publicados en protección contra incendios para tanques de GLP. Básicamente, se han desarrollado dos tipos de modelos:

- Modelos de zonas (en inglés, Lumped Model (LP)): En este tipo de modelos el dominio (1D) se divide en diferentes zonas, cada zona contiene un nodo central, punto de referencia para los cálculos. Para cada zona, las propiedades calculadas para un tiempo determinado son uniformes. Este tipo de modelos son modelos simplificados, dada la discretización del dominio.

- Modelos de Dinámica de Fluidos Computacional (en inglés, Computational Fluid Dynamics (CFD)): En este tipo de modelos se divide el volumen del tanque en elementos finitos, volúmenes muy pequeños, y se realizan los cálculos para cada uno de los elementos del sistema.

Ambos modelos resuelven sus cálculos a partir de ecuaciones diferenciales de balances de cantidad de movimiento, térmicos y másicos, y mediante la definición de los valores de entrada y las condiciones iniciales necesarias para la resolución de las ecuaciones. La principal diferencia entre ellos se basa en el número de “zonas” o elementos. En los modelos de zonas (modelos LP) el dominio se divide (en el caso más simple, cuando no hay protección térmica sobre el tanque) en 4 zonas diferentes (i.e. líquido, vapor, porción de la pared del tanque en contacto con el líquido, porción de la pared del tanque en contacto con el vapor). En cambio, un modelo de CFD necesitaría la definición de más de un millón de elementos, ya que utiliza volúmenes muy pequeños, para la totalidad del tanque.

Los modelos desarrollados consideran tres modos de exposición directa del tanque a la carga de fuego: Full engulfment (FE), cuando el tanque está completamente rodeado por las llamas; Partial Engulfment (PE), se refiere al contacto directo de la llama pero sólo parcialmente; Jet Fire (JF), referido al contacto directo de la llama pero en un punto determinado.

Graves et al. (1973) desarrollan un modelo de zonas y consideran que la temperatura del líquido y del vapor tienen el mismo valor, es decir, que ambos fluidos se encuentran en equilibrio térmico. La presión en el interior del tanque se calcula a partir de la temperatura del fluido, la cual puede ser la del líquido o la del vapor, indistintamente por lo que ya se ha comentado. También es importante destacar qué consideraciones se toman para los coeficientes de convección del fluido: en el caso del vapor, su valor se mantiene constante a lo largo de la simulación y para el líquido depende directamente de la temperatura de éste. Como se puede observar en la Tabla 2.3, el tanque se encuentra totalmente rodeado por el fuego (FE) y el modelo no contempla la opción de trabajar con capas de recubrimiento para la protección del tanque.

Tabla 2.3. Listado de modelos computacionales de depósitos de GLP afectados por un incendio. LP: *Lumped Model*; CFD: *Computational Fluid Dynamics*; FE: *Full Engulfment*; PE: *Partial Engulfment*; DS: *Distant source heat radiation*; JF: *Jet Fire*

Autor (año)	Nombre del modelo	Tipo de modelo computacional	Tipo de escenario de incendio	Definición de capas de protección térmica
Graves et al. (1973)	CALSPAN	LP	FE	×
Johnson (1984)	AFFTAC	LP	FE	✓
Ramskill et al. (1985)	ENGULF	LP	FE	×
Ramskill (1988)	ENGULF II	LP	FE, PE, JF	×
Beyon et al. (1988)	HEATUP	LP	FE, PE	✓
Dancer y Sallet (1990)	TAC7	LP	FE	×
Landucci et al. (2009)	ANSYS	CFD	FE	✓
Bi et al. (2011)	ANSYS	CFD	FE, PE	×
Landucci et al. (2016)	FLUENT/RADMOND	CFD/LP	FE, PE	×
Scarponi (2018)	FLUENT	CFD	FE, PE, DS	×
Bubbico (2018)	-	LP	FE	×

En el año 1984, el modelo computacional propuesto por Johnson (1984), AFFTAC (Analysis of Fire Effects on Tanks Cars), es usado por la US Federal Railroad Administration y por Transport Canada como estándar para estudiar el efecto del fuego en tanques de GLP, con unas características muy parecidas al modelo anterior, pero añadiendo un indicador más, i.e., el estudio de las propiedades mecánicas del tanque. De esta manera, este modelo permite controlar las tensiones superficiales para ver si puede darse una rotura de la pared del tanque previa a la obertura de la PRV. Así pues, tanto el modelo de

Graves et al. (1973) como el de Johnson (1984) no contemplan las condiciones de no equilibrio térmico que se dan dentro del tanque. Birk (1998) justifica que el error de precisión de estos dos modelos, en la validación con ensayos experimentales se debe a no tener en cuenta la situación de no equilibrio entre ambos fluidos.

Ramskill et al. (1985) propusieron el modelo de zonas “ENGULF”, esquematizado en la Figura 2.1. En este modelo se divide el dominio del fluido en dos zonas, zona de líquido (1) y zona de vapor (2), se definen 3 capas concéntricas simulando la pared del tanque en forma prisma, y éstas se dividen según la zona: vapor (4,6,8) y líquido (3,5,7). Por último, se definen 4 superficies, dos externas (D y C) y dos internas (B y A). De esta manera, se obtienen un total de 8 nodos y 4 superficies. La subdivisión de la pared del tanque es para calcular de forma más precisa la conducción a través de ésta. El modelo propuesto calcula la temperatura para cada una de las 8 zonas del dominio. La presión del sistema se calcula mediante la ecuación de los gases ideales y teniendo en cuenta la temperatura del nodo de vapor (2) de la Figura 2.1. Para el cálculo de los coeficientes de convección del líquido y del vapor se utilizan correlaciones empíricas diferentes para cada uno de los fluidos. La principal diferencia con los modelos anteriores es que este modelo tiene en cuenta la situación de no-equilibrio térmico entre el líquido y el vapor, suponiendo que las temperaturas entre ambos son diferentes. Por último, el modelo contempla que el tanque está completamente rodeado por el fuego.

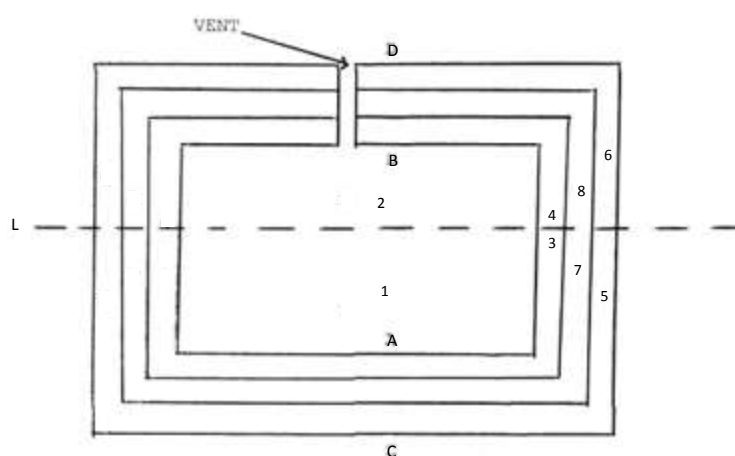


Figura 2.1. Discretización dominio código “ENGULF” – Figura adaptada Ramskill et al. (1985)

En el año 1988 se desarrolló una mejora del modelo “ENGULF” con el nombre de “ENGULF II”. Ramskill (1988) implementa una geometría cilíndrica y deja de lado la geometría en forma de prisma del primer modelo, la cual introducía errores de precisión por ello. Se introdujeron diferentes escenarios de fuego como condición de contorno (FE y PE). También se tuvo en cuenta la posibilidad de definir capas de protección contra incendios y se consideró el momento de ruptura del tanque teniendo en cuenta las

tensiones de esfuerzo a las que es sometido durante la presurización y el límite elástico del material del depósito.

Beyon et al. (1988) presentaron el modelo computacional “HEATUP”, un modelo basado en la definición de dos zonas para el fluido: zona de líquido y de vapor. La presión interna del tanque viene definida por la presión de saturación del líquido, es decir, la presión del tanque se considera igual que la presión de saturación a la temperatura del líquido. También, permite definir dos tipos de escenario: tanque completamente rodeado de fuego (FE) o parcialmente rodeado (PE). Y siguiendo con la tendencia de los modelos anteriores, también permite introducir capas de protección.

Dancer y Sallet (1990) propusieron un modelo llamado “TAC7”, basado en una discretización del dominio bastante más compleja, como se muestra en la Figura 2.2. La nomenclatura para la subdivisión del dominio es la siguiente: WLO , $WV0$, WLm , ... corresponde a los nodos de la pared del tanque; LO , $BL1$, ..., BLm y $CL1$, ..., CLm corresponden a nodos de la fase líquida; $V0$, $BV1$ y $CV1$, ..., CVn son los nodos de la fase vapor. En este modelo, la presión del tanque se calcula teniendo en cuenta la hipótesis de Beyon et al. (1988) y utilizando el valor de la temperatura del nodo más cercano a la interfaz líquido-vapor, el nodo CLm .

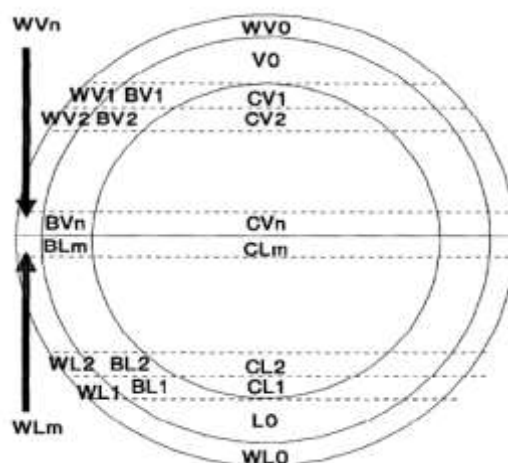


Figura 2.2. Discretización dominio modelo “TAC7” – imagen original Dancer et al. (1990)

Los siguientes modelos propuestos para el estudio del comportamiento de tanques de GLP se desarrollan mediante la implementación de un modelo de elementos finitos, es decir, utilizando herramientas CFD. Este tipo de herramientas, con el avance del tiempo y la tecnología, han ido mejorando sus prestaciones, por eso, se pueden diferenciar dos etapas de investigación en el estudio de tanques de GLP afectados por un incendio.

Las dos primeras referencias CFD (Landucci et al. (2009), Bi et al. (2011)) presentan un modelo computacional para el análisis de la pared del tanque. Para ello utilizan también datos experimentales recogidos por los mismos autores.

Con el paso del tiempo, las herramientas CFD también empezaron a utilizarse para trabajar con fluidos. Es por ello que en la siguiente etapa se trabaja sobre el fluido. Se tiene en cuenta la pared del tanque, pero en estos estudios la pared no es discretizada en un gran número de elementos, dado que estas simulaciones se basan en el estudio del fluido del interior del depósito. Las publicaciones Landucci et al. (2016) y Scarponi et al. (2018) hacen referencia a este tipo de estudios, simulaciones en 2D y 3D, para el estudio de los fenómenos físicos presentes dentro y fuera del tanque afectado por un incendio, ya que el modelo de zonas presenta limitaciones para describir estos fenómenos a partir de correlaciones simples. Respecto a la diferencia entre las simulaciones en 2D o 3D es el número de elementos presentes en el dominio que afecta directamente al tiempo computacional total de la simulación. Este tipo de simulaciones permite definir como condición de contorno diferentes escenarios, el más sencillo sería el tanque completamente rodeado por llamas (FE) y el más complejo sería plantear el efecto de un incendio a cierta distancia del tanque (DS).

En el caso de Landucci et al. (2016) comparan los resultados obtenidos por CFD con los calculados a partir de un modelo de zonas. El modelo de zonas planteado divide el fluido en dos partes, zona del líquido y del vapor, ambos en situación de no equilibrio térmico. Plantea diferentes correlaciones para el cálculo de los coeficientes de convección del líquido y del vapor. Y la principal diferencia con los modelos anteriores es que calcula la presión a partir de la contribución de ambos fluidos.

El último modelo de la Tabla 2.3 ha sido publicado en el año 2017 y se basa en un modelo de zonas. Bubbico et al. (2017) dividen el dominio del fluido en dos zonas, líquido y vapor, y su zona correspondiente para cada pared en contacto con el fluido. Define la presión interior como la presión de saturación correspondiente a la temperatura del líquido. Para el cálculo de las correlaciones de los coeficientes de convección, en el caso del vapor las ecuaciones se mantienen a lo largo de la simulación, pero para el líquido se considera que el fluido se encuentra subenfriado, es decir, que el fluido puede encontrarse en diferentes etapas: convección natural, nucleación o ebullición, adoptando una correlación diferente para cada caso. Este modelo no contempla la opción de capas de protección y tampoco la calor perdida por el sistema en el proceso de condensación en las paredes del tanque.

3. Modelo computacional

El modelo presentado a continuación se basa en el modelo propuesto por Landucci et al. (2016). Estos autores han planteado el modelo computacional y han cedido su trabajo con el objetivo de continuar generando información respecto al estudio de tanques GLP afectados por un incendio.

Este apartado se divide en dos bloques, el primero pretende dar a entender los fenómenos físicos planteados en el modelo, la definición de los flujos y/o caudales térmicos y másicos, las consideraciones a tener en cuenta y la justificación de todo el conjunto. El segundo bloque se basa en la implementación de los caudales térmicos en cada zona del dominio, obteniéndose de esta forma, un sistema de ecuaciones capaz de simular el comportamiento dinámico para cada uno de los nodos definidos.

3.1. Modelo físico-termodinámico

El modelo base contempla una situación de “total engulfment”, donde el flujo de calor es uniforme para toda la superficie del tanque. Moodie et al. (1982) definen que el flujo de calor que emite un incendio de charco de hidrocarburos se encuentra dentro del rango de 100-120 kW/m². Este rango de valores puede ser útil para la definición de nuevos escenarios en el análisis de sensibilidad, dado que para la validación se utilizarán los flujos incidentes medidos experimentalmente por Moodie et al. (1982, 1988).

3.1.1. Flujos y caudales térmicos

La Figura 3.1 muestra los flujos y caudales térmicos presentes en un tanque cilíndrico totalmente rodeado de fuego. Analizando la figura de fuera hacia dentro, toda la pared exterior del tanque es calentada por el flujo de calor aportado por el incendio, q_{in} [kW/m²]. Este flujo térmico se puede definir mediante la suma de aportaciones térmicas: radiación y convección. Continuando hacia el interior, la transferencia térmica a través de la pared del tanque se lleva a cabo por conducción, q_s [kW]. Una vez situados en el punto de contacto entre sólido y fluido, se diferencia el líquido del vapor dada la situación de no-equilibrio térmico; se define un caudal convectivo diferente para cada uno, q_L [kW] y q_v [kW], líquido y vapor, respectivamente. También, se tiene en cuenta el caudal de calor que recibe la zona de líquido por radiación de la pared interior en contacto con el vapor, q_{rad} [kW]. Por último, se considera un caudal convectivo entre el líquido y el vapor, q_{L-v} [kW], dado que ambos fluidos se encuentran a temperaturas diferentes. Además, cuando a PRV se activa aparece un nuevo caudal de calor asociado a la vaporización del gas licuado (q_{PR} ; kW).

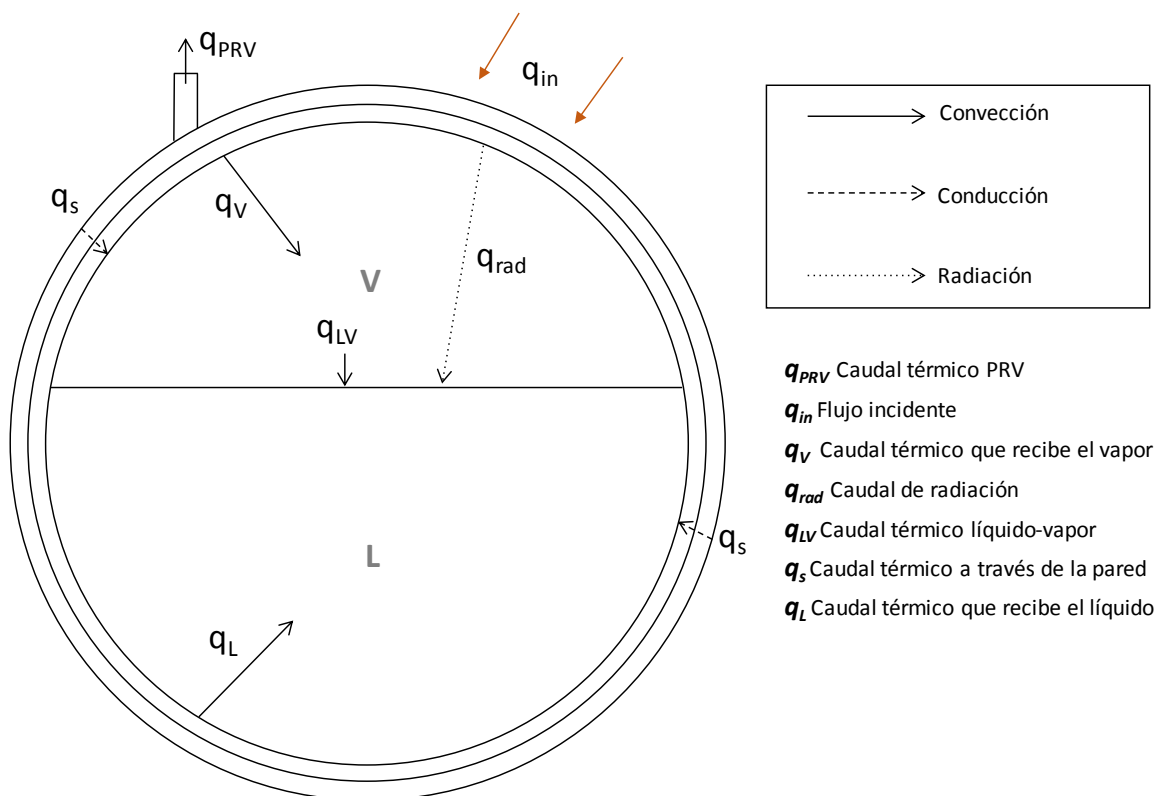


Figura 3.1. Esquematzación de los flujos térmicos en el depósito (vista de perfil)

En el Anexo A se definen las ecuaciones para los caudales térmicos de conducción, convección y radiación, una vez discretizado el volumen de control o dominio, representado en la Figura 3.2.

3.1.2. Presión

El modelo calcula la presión teniendo en cuenta la contribución del líquido y del vapor, obteniéndose y suponiendo un valor uniforme para todo el fluido (Landucci et al., 2016). A partir de la información recopilada en el estado del arte, el modelo considera asumir que el valor de la presión depende únicamente del líquido, cuando el valor de la temperatura es uniforme para el nodo, implicara demasiada dependencia en el modelo por parte del líquido. Por lo tanto, la contribución del líquido viene dada por la presión del sistema y la del vapor considerando que se comporta como un gas ideal.

3.1.3. Válvula de alivio de presión (PRV)

Los comerciales de depósitos de GLP instalan válvulas de alivio por motivos de seguridad. En caso que la presión del tanque aumente considerablemente y llegue hasta el valor de la presión de seguridad, la válvula se abre permitiendo la salida de fluido a través de ella y así se reduce la presión del tanque.

Aunque el fluido que sale a través de la válvula, en la realidad, se trata de una mezcla de líquido y vapor, para no aumentar la complejidad del modelo presentado el caudal de salida de la válvula se considera 100 % vapor.

Según la diferencia de presión y la relación entre la capacidad calorífica a presión constante y la capacidad calorífica a volumen constante, el caudal de salida de la válvula puede tener dos velocidades: sónica o subsónica. Para tener un flujo sónico se tiene que cumplir la siguiente relación (Casal (2008)):

$$\frac{P_{in}}{P_{out}} \geq \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (ec. 1)$$

Donde

P_{in} es la presión interior del tanque [Pa]

P_{out} es la presión ambiente [Pa], se considera 101325 Pa.

γ es la relación entre capacidades caloríficas, en el caso del propano tiene un valor de 1,13.

Considerando que el valor de γ es constante para este tipo de situaciones y que cuando la válvula se encuentre abierta trabajará en condiciones sónicas, se define el caudal másico de salida de vapor de la siguiente forma (Casal (2008)):

$$F_i = A_{PRV} \cdot C_D \cdot P_{in} \sqrt{\gamma \cdot \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}} \cdot \frac{M}{Z \cdot T_v \cdot R}} \quad (ec. 2)$$

Donde:

A_{PRV} es el área de salida de la válvula [m²]

C_D es el coeficiente de descarga, adimensional (0,62).

P_{in} es la presión interior del tanque [Pa]

γ es la relación entre capacidades caloríficas, en el caso del propano tiene un valor de 1,13.

M es la masa molecular del propano [kg/kmol]

Z el factor de compresibilidad

T_v la temperatura del vapor [K]

R constante de los gases ideales (0,082 atm·L/ K ·mol)

Una vez abierta la PRV, el flujo másico de salida provoca una pérdida de calor en el sistema, provocando una posible disminución de la temperatura en el nodo de vapor. Este caudal viene dado a partir de siguiente relación:

$$q_{PRV} = F_i \cdot H_v \quad (ec. 3)$$

Siendo F_i es el flujo másico de salida [kg/s] y H_v es la entalpía específica de la fase vapor [J/kg].

3.1.4. Caudal de evaporación

Si el líquido alcanza la temperatura de ebullición, el propano se evapora. Como el modelo trabaja con las masas totales de líquido y vapor, será necesario hacer un seguimiento del propano evaporado. Mediante el flujo total de calor que recibe el líquido y el calor latente del propano, se mide el caudal másico evaporado, según la siguiente ecuación (Zinnamosca, 2002):

$$\frac{\Delta m_l}{\Delta t} = \frac{c_{pl} \cdot m_l \cdot \Delta T_l}{\lambda_{ev}} \quad (ec. 4)$$

Donde:

Δm_l masa de propano evaporado [kg]

Δt intervalo de tiempo [s]

c_{pl} capacidad calorífica del propano líquido [J/kg·K]

m_l masa total de propano líquido [kg]

ΔT_l variación de temperatura del líquido [K]

λ_{ev} calor latente de vaporización [J/kg]

3.1.5. Nivel del tanque

Dadas las circunstancias del escenario, el caudal evaporado será elevado y esto afectará directamente al nivel del tanque que, a su vez, será una variable para el cálculo de las áreas de contacto de cada fluido con la parte correspondiente de la pared del tanque. La ecuación implícita para calcular el nivel inicial del tanque (L_i) en base al nivel de llenado al principio de la simulación (NLI) se indica en la ecuación 5 (Valiente y Gómez, 2016).

$$\frac{NLI}{100}\pi = \arccos\left(\frac{R_i - L_i}{R_i}\right) - \sin\left(\arccos\left(\frac{R_i - L_i}{R_i}\right)\right) \cdot \left(\frac{R_i - L_i}{R_i}\right) \quad (ec. 5)$$

Donde:

NLI nivel de llenado inicial del tanque [%]

R_i es el radio interior del tanque [m]

L_i nivel del tanque inicial [m]

Una vez que la simulación empieza a correr, partiendo del valor del nivel del tanque obtenido con la ecuación 5, el nivel del tanque (L) se obtiene a partir de la variación de la masa de líquido, la densidad de éste y la variación de nivel respecto al volumen de líquido (véase la ecuación 6, Landucci (2016)).

$$L = \frac{m_L}{2 \cdot \rho_L \cdot leng \cdot \sqrt{R_i^2 - (R_i^2 - L^2)}} \quad (ec. 6)$$

3.1.6. Fenómeno de estratificación

La estratificación es un fenómeno físico presente en las etapas de convección natural y nucleación durante la situación de calentamiento de un líquido subenfriado (Anexo A). Se crea una capa de fluido entre la pared interna del tanque y la capa más externa del líquido, debido a la diferencia de temperaturas. La capa adquiere un movimiento circular ascendente. Desde el punto central más bajo del diámetro ésta circula rodeando el diámetro del tanque hasta llegar a la parte superior del líquido, donde se dirige hacia el centro para descender hasta abajo. A modo de ejemplo de este fenómeno, en la Figura 3.2. se muestra una simulación en 2D en la cual se observa la estratificación (Scarponi, 2018). Se representan los vectores de velocidad del fluido para dos tiempos diferentes de simulación (60 s y 180 s).

Observaciones experimentales muestran que la profundidad de la zona ocupada por el líquido, es decir, el nivel de llenado tiene un gran peso para que se dé el fenómeno de estratificación. Cuanto mayor sea el nivel del líquido dentro del tanque, más evidente será el fenómeno de estratificación (Aydemir et al., 1988).

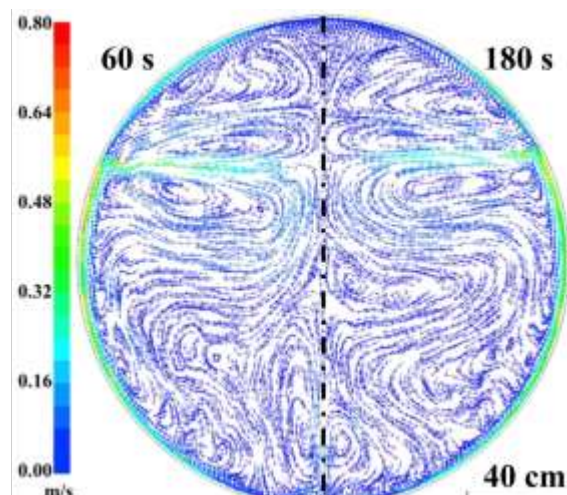


Figura 3.2. Representación vectorial de las velocidades del fluido en el interior del tanque. Izquierda: tiempo 60s; derecha: tiempo 180s. (Scarponi (2018))

Teniendo en cuenta que el modelo propuesto se basa en un modelo de zonas simplificado, considerar el fenómeno dificultaría la redacción del código. Además, diferentes autores (Chen y Lin (1999), Shebeko et al. (2000) y Salzano et al. (2003)) han comparado sus modelos computacionales, los cuales no tenían en cuenta la estratificación, con ensayos experimentales y han obtenido buenas validaciones. De aquí que se dé como válida la opción de no tener en cuenta el fenómeno de estratificación.

3.2. Implementación del modelo computacional

En este apartado se explica la aplicación del modelo de zonas para un tanque cilíndrico sin cabezales semiesféricos en sus laterales. Para reproducir el comportamiento transitorio del tanque y su interior, se integrará un sistema de ecuaciones diferenciales en cada nodo definido del dominio o volumen de control.

3.2.1. Discretización del tanque

La discretización de las zonas del tanque se lleva a cabo con el perfil en 2D de un tanque cilíndrico. En la Figura 3.3 se definen las diferentes zonas del dominio y toda la nomenclatura relacionada con el sistema de ecuaciones implementado. Referente a la nomenclatura, SSV es la pared exterior en contacto con el vapor, SV es la pared interior en contacto con el vapor, V es la zona del vapor, L pertenece a la zona del líquido, SL es la pared interior en contacto con el líquido y SSL es la pared exterior en contacto con el líquido. También hay que tener en cuenta que st y jt hacen referencia al espesor de SL o SV y al espesor de SSL y SSV , respectivamente. El espesor total es Ss .

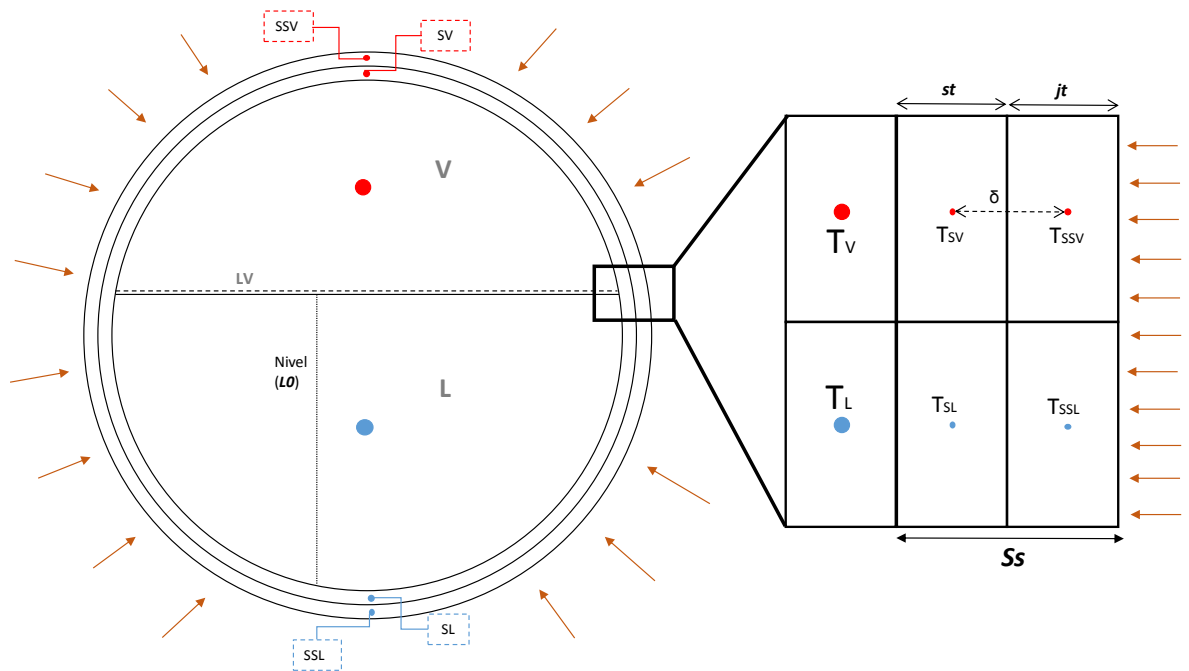


Figura 3.3. Configuración de los nodos y las zonas para un tanque horizontal

En la Figura 3.3 se puede diferenciar la zona de líquido (**L**), la zona de vapor (**V**) y la interfaz líquido-vapor (**LV**), la cual viene determinada por el nivel del tanque (**LO**). El espesor del tanque es discretizado en dos, de manera que el modelo implementado trabaja con el área interna y externa del tanque. Teóricamente, se mejora la precisión de los cálculos, aunque no implica una mejora significativa, ya que la resistencia a la transferencia de calor se considera muy pequeña.

3.2.2. Sistema de ecuaciones

Para la resolución del comportamiento transitorio se plantea un sistema de ecuaciones diferencial. En la Tabla 3.1 se definen las ecuaciones para cada nodo del dominio (Landucci et al., 2016).

Tabla 3.1. Sistema de ecuaciones del modelo computacional. BE: balance de energía; BM: balance de materia; L: líquido; V: vapor; SL: nodo pared interior-líquido; SV: nodo pared interior-vapor; SSL: nodo pared exterior-líquido; SSV: nodo pared exterior-vapor.

L (BE)	$m_L C_{pL} \frac{dT_L}{dt} = q_L + q_{LV} + q_R \quad (ec. 7)$
L (BM)	$-\frac{dm_L}{dt} = \frac{q_L + q_{LV} + q_R}{\lambda_{ev}} \quad (ec. 8)$
V (BE)	$m_V C_{pV} \frac{dT_V}{dt} = q_V - q_{LV} + \frac{dm_L}{dt} \left(C_{pV} (T_V - T_L) - \frac{R T_L}{M} \right) - \frac{F_i R T_V}{M} \quad (ec. 9)$
V (BM)	$\frac{dm_V}{dt} = \frac{q_L + q_{LV} + q_R}{H_V} - F_i \quad (ec. 10)$
SL	$\delta_s \rho_s C_{p_s} \left(\frac{A_{L_{av}} + A_{L_{int}}}{2} \right) \frac{dT_{SL}}{dt} = -q_L + \frac{k_s}{st} A_{L_{av}} \cdot (T_{SSL} - T_{SL}) \quad (ec. 11)$
SV	$\delta_s \rho_s C_{p_s} \left(\frac{A_{V_{av}} + A_{V_{int}}}{2} \right) \frac{dT_{SV}}{dt} = -q_V - q_R + \frac{k_s}{st} A_{V_{av}} \cdot (T_{SSV} - T_{SV}) \quad (ec. 12)$
SSL	$\frac{\delta_s}{2} \rho_s C_{p_s} \left(\frac{A_{L_{ext}} + A_{L_{av}}}{2} \right) \frac{dT_{SSL}}{dt} = -A_{L_{ext}} \frac{k_s}{jt} (T_{SSL} - T_{SL}) + A_{L_{ext}} q_{IN} \quad (ec. 13)$
SSV	$\frac{\delta_s}{2} \rho_s C_{p_s} \left(\frac{A_{V_{ext}} + A_{V_{av}}}{2} \right) \frac{dT_{SSV}}{dt} = -A_{V_{ext}} \frac{k_s}{jt} (T_{SSV} - T_{SV}) + A_{V_{ext}} q_{IN} \quad (ec. 14)$
Presión	$\frac{dp}{dt} = \frac{\rho_V}{m_V} \left(\frac{P}{\rho_L} \frac{dm_L}{dt} + \frac{R m_V}{M} \frac{dT_V}{dt} \right) \quad (ec. 15)$
Nivel	$\frac{dL}{dt} = \frac{1}{\rho_L} \left(\frac{dL}{dV_L} \right) \frac{dm_L}{dt} \quad (ec. 16)$

3.2.3. Hipótesis y simplificaciones

Para la resolución del sistema de ecuaciones se han adoptado un conjunto de hipótesis y simplificaciones:

- La temperatura de cada nodo es uniforme para todo el volumen ocupado por cada zona.
- La presión es uniforme para todo el dominio del tanque.
- La condición de contorno, flujo incidente por parte del incendio, es uniforme en toda la superficie exterior del tanque.
- Las propiedades físicas, termodinámicas y de transporte son uniformes por zona.
- La temperatura del líquido no podrá sobrepasar el valor de la temperatura de ebullición.
- El código define dos escenarios posibles para la resolución del sistema: no ebullición y ebullición. Esto afecta de manera directa a las ecuaciones diferenciales del sistema de ecuaciones. Para el caso de no ebullición la masa de líquido y, consecuentemente, el nivel del tanque no variará; por lo tanto, las ecuaciones 8 y 16 serán 0. En caso contrario, el líquido cambia de fase a temperatura constante, por lo tanto, la ecuación 7 será 0. Al tratarse de ecuaciones diferenciales, el 0 representa no variación temporal.
- La condición de condensación que se da en la pared interior del tanque se considera insignificante en comparación a la cantidad de materia presente en el depósito (Bubbico et al., 2017).

A continuación, se describen las correlaciones para el cálculo de las propiedades termodinámicas del fluido y del sólido. Todas las propiedades definidas serán inputs para el modelo computacional, necesarios para poder llevar a cabo la simulación.

Como se ha comentado anteriormente, el fluido se considera propano puro y sus propiedades termodinámicas y físicas se definen en la Tabla 3.2. Las correlaciones empíricas de la Tabla 3.2. relacionan las propiedades físico-termodinámicas con la presión o temperatura del fluido correspondiente (Knudsen et al., 1999). El objetivo de utilizar estas correlaciones, trabajando con un sistema simplificado, es intentar mejorar la precisión de los cálculos, pero sin afectar al tiempo computacional.

En el caso del material sólido del tanque, se considera que se trata de acero AISI 304 y sus propiedades se consideran constantes a lo largo del tiempo. La Tabla 3.3 recoge el conjunto de propiedades del sólido necesarias para la simulación.

Tabla 3.2. Propiedades termodinámicas y físicas del propano

Parámetro	Correlación [T en K; P en Pa]
Densidad de líquido [kg m^{-3}]	$\rho_L = -24,063 + 4,9636T - 0,0109T^2$ (ec. 17)
Densidad de vapor [kg m^{-3}]	$\rho_V = \frac{P \cdot M}{R \cdot T}$ (ec. 18)
Capacidad calorífica líquido [$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$]	$C_{pL} = 36309 - 230,2T + 0,3941T^2$ (ec. 19)
Capacidad calorífica vapor [$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$]	$C_{pV} = 168,03 + 5,6056T - 0,0014T^2$ (ec. 20)
Conductividad térmica líquido [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]	$k_L = 0,26755 - 6,60 \cdot 10^{-4}T + 2,77 \cdot 10^{-7}T^2$ (ec. 21)
Conductividad térmica vapor [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]	$k_v = -0,0088 + 6,00 \cdot 10^{-5}T + 1,00 \cdot 10^{-7}T^2$ (ec. 22)
Viscosidad dinámica líquido [Pa s]	$\mu_L = 709137T^{-3,986}$ (ec. 23)
Viscosidad dinámica vapor [Pa s]	$\mu_v = 4,9054 \cdot 10^{-8}T^{0,90125}$ (ec. 24)
Temperatura de saturación [K]	$T_{sat} = 253,76 + 5,0 \cdot 10^{-5}P - 6,0 \cdot 10^{-12}P^2$ (ec. 25)
Calor latente [J/kg]	$\lambda_{ev} = \frac{2,92 \cdot 10^7 \cdot \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{(0,78267 - 0,7732 \cdot \frac{T}{T_c} + 0,3925 \cdot (\frac{T}{T_c})^2)}}{M}$
Tensión superficial [N/m]	$\sigma_{sup} = 0,5092 \cdot \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1,2197}$ (ec. 27)
Emisividad	0,9

Tabla 3.3 Propiedades del acero AISI-304

Parámetro	Valor
Densidad [kg m^{-3}]	7800
Capacidad calorífica [$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$]	490
Conductividad térmica [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]	50
Emisividad	0,9
Límite elástico [MPa]	400

En la Figura 3.4 se esquematiza el proceso de simulación con el objetivo de facilitar la comprensión de los resultados obtenidos a partir del código computacional. Primero de todo, es necesaria la definición de las variables de entrada, la propiedades y condiciones iniciales del tanque y del fluido, además de la definición de las funciones o variables dependientes del tiempo. En el módulo computacional se define el sistema de ecuaciones a resolver, antes se actualizan los valores de las variables del sistema (propiedades físico-termodinámicas del propano, áreas). Para la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias se utiliza la función ODE45 de MATLAB. Una vez obtenidos los resultados de cada iteración, antes de ser cargados para el siguiente intervalo de tiempo, el código comprueba si se superan los valores de referencia de la PRV o del límite elástico del acero. Una vez finalizada la simulación, se recogen todos los datos proporcionados para cada balance del sistema de ecuaciones.

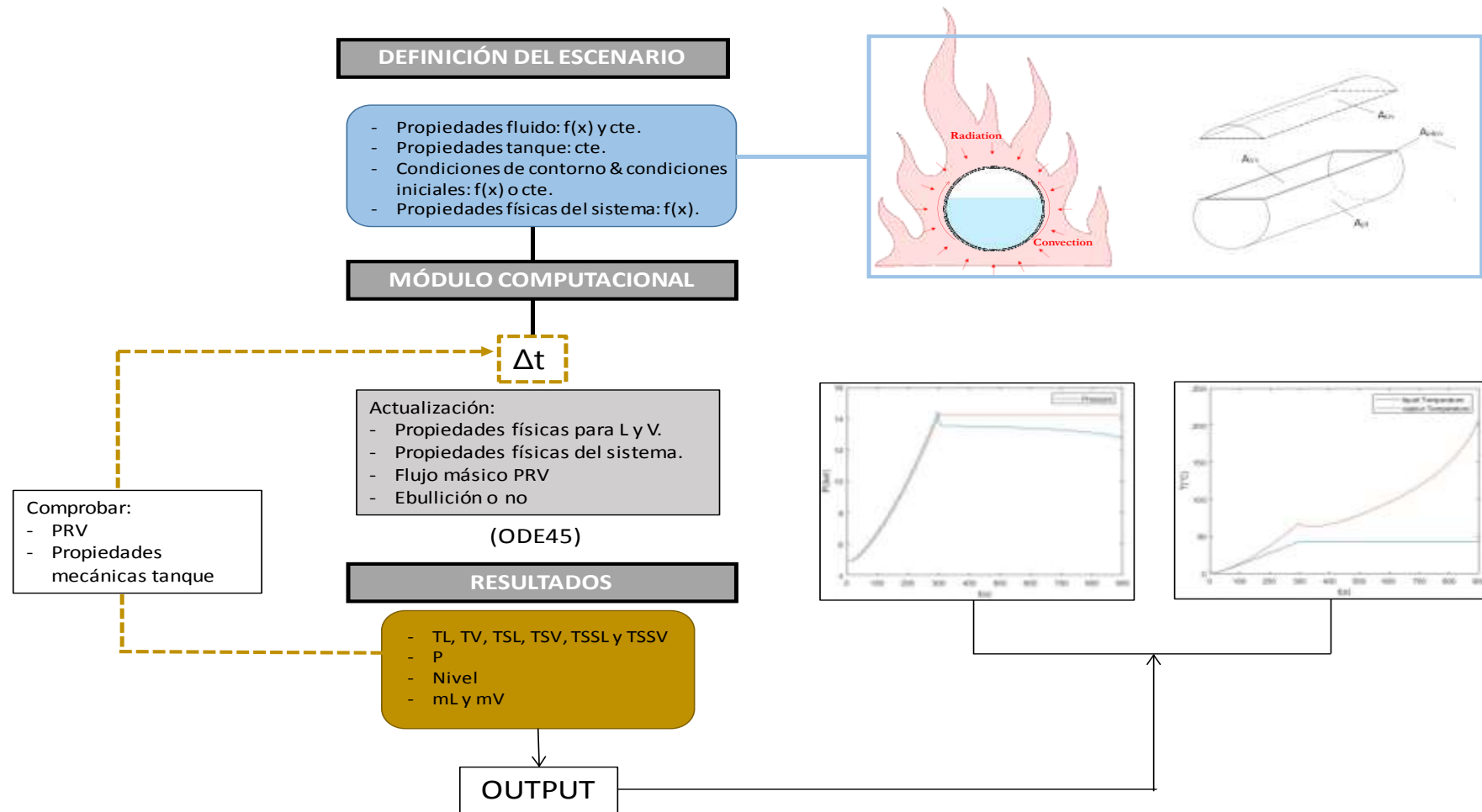


Figura 3.4. Esquematización proceso de simulación

4. Resultados y discusión

Este apartado se basa en la evaluación del modelo computacional a partir del análisis de diferentes aspectos presentes en la simulación. La Figura 4.1 muestra de forma esquemática los conceptos y las relaciones entre los procesos de validación y verificación de los modelos computacionales.

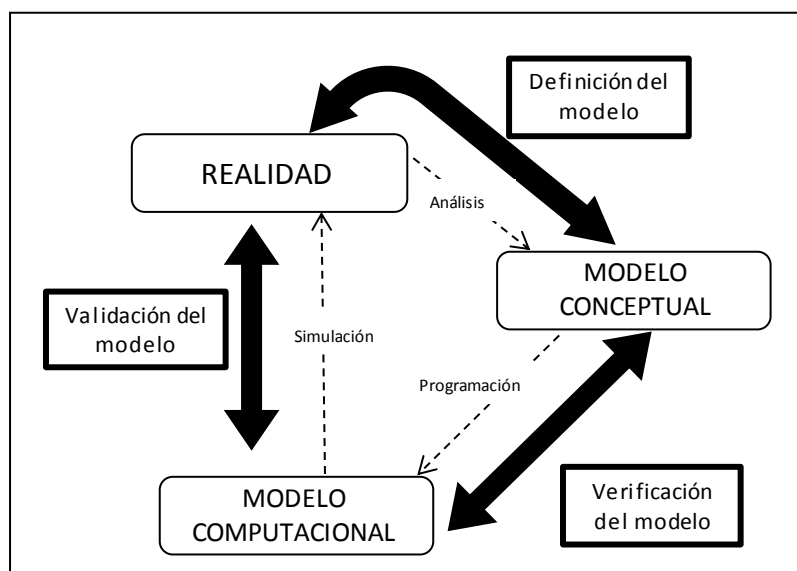


Figura 4.1. Esquema proceso (Adaptada de Schlesinger et al. (1979))

Como se puede observar en la figura, se parte de un escenario real y, a partir de éste, se plantea un modelo conceptual (definición del escenario), el cual se acaba traduciendo en un modelo computacional para la simulación del escenario planteado.

La validación del modelo se basa en la comparación de los resultados obtenidos a partir del modelo computacional con los valores experimentales, con el objetivo de comprobar si el modelo conceptual reproduce con fidelidad los resultados experimentales.

La verificación del modelo computacional se lleva a cabo para corroborar que el intervalo de tiempo definido para las simulaciones no provoca una variación en los resultados, es decir, que los resultados del modelo computacional son independientes del tiempo de computación definido.

4.1. Validez experimental

Para la validación del modelo computacional se utilizan los datos reportados por Moodie et al. (1982 y 1988), los cuales presentan en forma de gráficos la evolución de la presión en el interior del tanque. Se valida el modelo para dos tipos de tanque (1 tonelada y 5 toneladas), para ver cómo responde el

modelo según el volumen del tanque y según el nivel de llenado. El ensayo realizado por Moodie et al. (1982) con un tanque de 0,25 toneladas no se tiene en cuenta ya que sólo se pudo realizar un único test.

En la Tabla 4.1 se definen las condiciones iniciales necesarias para poner en funcionamiento tres simulaciones del tanque de 1 tonelada con distintos niveles de llenado. Se tienen en cuenta las dimensiones del tanque definidas en la Tabla 2.2.

Tabla 4.1. Condiciones iniciales del sistema según Moodie et al. (1982) para tanques de 1 tonelada

Identificador	Nivel de llenado [%]	Presión inicial [bar]	Presión PRV [bar]	Flujo incidente ^a [kW/m ²]
1tn-20	20	5,1	14,3	33
1tn-40	40	5,1	14,3	59
1tn-80	80	7,1	14,3	84

^a Según Moodie et al. (1982)

De la misma manera, en la Tabla 4.2. se presentan las condiciones iniciales asociadas a las simulaciones de un tanque de 5 toneladas con diferentes niveles de llenado.

Tabla 4.2. Condiciones iniciales del sistema según Moodie et al. (1988) para tanques de 5 toneladas

Identificador	Nivel de llenado	Presión inicial [bar]	Presión PRV [bar]	Flujo incidente ^a [kW/m ²]
5tn-22	22%	5,5	14,3	99
5tn-36	36%	5,2	14,4	101
5tn-58	58%	5,6	15,5	100 ^b
5tn-72	72%	5,8	14,7	96

^a Según Moodie et al. (1988); ^b Valor supuesto según los otros valores de flujo obtenidos. No hay ningún valor definido en Moodie et al. (1988)

La Tabla 4.3 recoge las otras variables de entrada y parámetros tenidos en cuenta para la simulación, la única diferencia a tener en cuenta entre los dos tanques es el área de la PRV, ya que el tiempo total de simulación (número de iteraciones x intervalo de tiempo) se ha definido para sobrepasar el tiempo de apertura de la PRV.

Tabla 4.3. Variables y parámetros de entrada para la simulación de ambos tanques (1 ton y 5 ton)

Variables		1 ton	5 ton
Área PRV [cm ²]		5	14
Temperatura ambiente [°C]		25	25
Tiempo de computación [s]		0,1	0,1
Número total de iteraciones		8000	8000

Para la validación se comparan las curvas de presurización experimentales y las obtenidas mediante el modelo computacional. El tiempo de obertura de la PRV, también, será un output a tener en cuenta para comprobar la adaptación del modelo.

En el caso de un tanque de 1 tonelada, la Figura 4.2 muestra las curvas de presurización obtenidas. Se presentan dos curvas para el modelo de zonas. Una de ellas incorpora un desfase temporal de 90 s respecto a la otra. Este tiempo de desfase ha sido determinado a partir de los datos experimentales. Se ha tenido en cuenta el instante en que el valor de la presión varía una décima respecto al valor del tiempo experimental anterior. Cabe destacar que este tiempo se encuentra dentro del rango definido por Moodie et al. (1982) para el desarrollo completo del incendio (1-2 minutos).

Cuando el tanque tiene un nivel de llenado del 20% (Figura 4.2a) las curvas presentan tendencias diferentes. El modelo computacional no es capaz de simular correctamente el comportamiento de la presión dentro del tanque ya que se calcula que la presurización se produce de manera más lenta respecto a lo que se observa experimentalmente. Esto quiere decir que el modelo computacional no se adapta bien para volúmenes tan pequeños.

En la Figura 4.2b se observa una mejora en la simulación de la presurización, pero aun así la tendencia calculada con el modelo no sigue el comportamiento experimental. El modelo computacional predice la evolución de la presión de manera más lenta que lo que sucede en la realidad.

En el caso del tanque al 80%, el modelo computacional es capaz de reproducir fielmente la presurización del sistema teniendo en cuenta el desfase temporal de 90 s (Figura 4.2c).

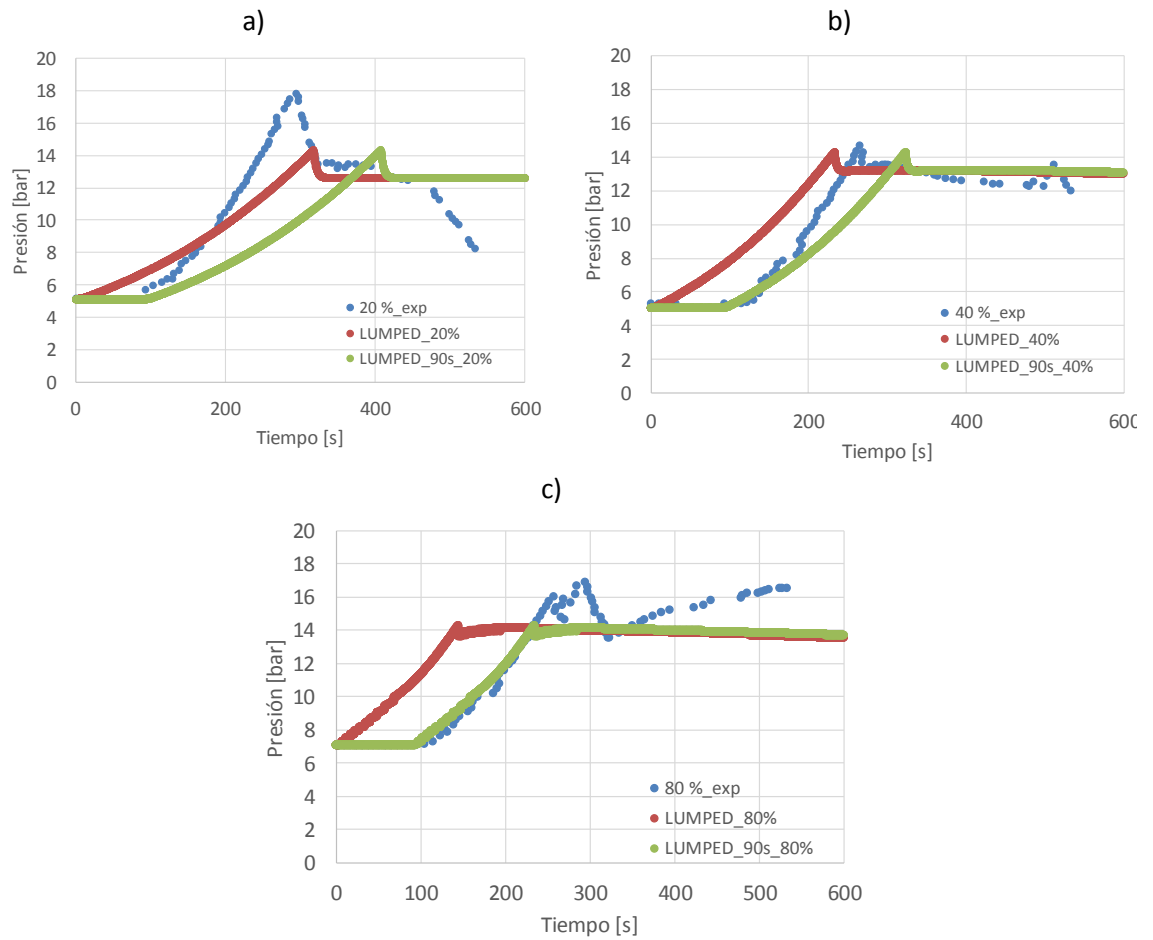


Figura 4.2. Curvas de presurización experimentales (en azul) y obtenidas con el modelo (en rojo y verde) para un depósito de 1 tonelada con distintos niveles de llenado: a) 20%; b) 40%; c) 80%. La serie de datos de color verde incorpora un desfase temporal de 90 s respecto a la serie de datos roja.

Según estos resultados, se observa una clara dependencia entre el nivel de llenado del tanque y la tendencia de la curva de presurización del modelo, dado que cuanto más cantidad inicial de propano hay en el tanque, el modelo simula una curva de presurización con mayor pendiente. Esto viene dado por el gran peso que tiene el líquido en el modelo implementado. Como se puede observar en la Figura 4.3, antes de la apertura de la PRV, el caudal de calor que recibe el líquido, q_L , es superior al resto de caudales térmicos. Para Figura 4.3a y 4.3b la simulación no llega hasta los 600 s debido a que todo el líquido se evapora y la simulación se da por acabada.

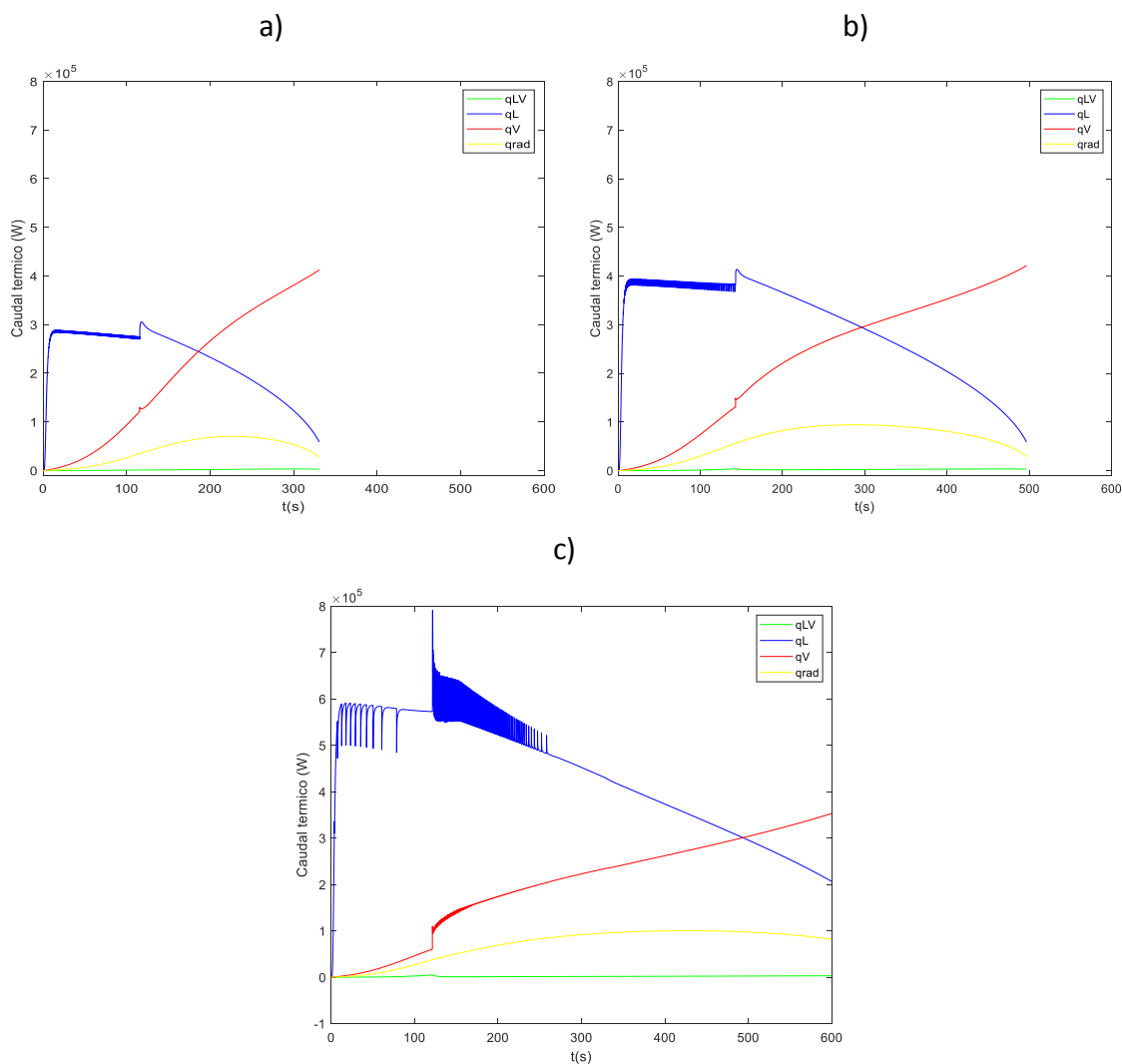


Figura 4. 3. Curvas de caudales térmicos presentes en el sistema para un depósito de 1 tonelada para diferentes niveles de llenado: a) 20%, b) 40% y c) 80%.

La Figura 4.4 muestra una comparativa de los tiempos de obertura de la PRV obtenidos experimentalmente (eje de abscisas) y los calculados con el modelo de zonas (eje de ordenadas).

Para un nivel de llenado del 20%, el resultado experimental del tiempo de obertura de la PRV es de 297 s y el calculado con el modelo de 407 s; para un nivel de llenado del 40%, los valores se aproximan más pero también existe una gran diferencia, 262 s (valor experimental) y 328 s (valor obtenido con el modelo con 90 s de desfase). Para ambos niveles de llenado los tiempos obtenidos tienen un error superior al 15%.

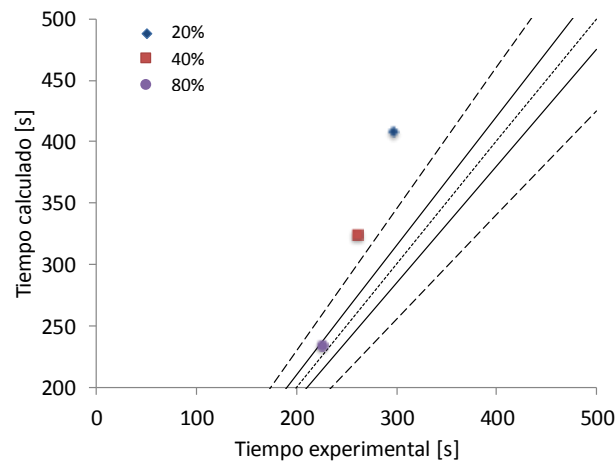


Figura 4. 4. Tiempos de obertura de la válvula de alivio PRV obtenidos experimentalmente respecto a los calculados con el modelo de zonas para un tanque de 1 tonelada y diferentes niveles de llenado. Línea de puntos: ajuste perfecto; línea sólida: $\pm 5\%$ de error; línea discontinua: $\pm 15\%$ de error.

Los tiempos de obertura de la PRV para el tanque con un nivel de llenado del 80% son de 226 s (experimental) y 235 s (calculado con un desfase de 90 s). La diferencia entre ambos valores es inferior al 5 %, por lo tanto, el modelo es capaz de estimar correctamente el tiempo de obertura de la PRV para un tanque de 1 tonelada con este nivel de llenado.

Los resultados obtenidos con el modelo para un tanque de 5 toneladas y un nivel de llenado del 22% se muestran en la Figura 4.5a. Se puede ver que se adaptan bastante bien a los valores experimentales considerando el tiempo de desfase correspondiente (fijado del mismo modo que para las pruebas con un tanque de 1 tonelada), pero sólo hasta la obertura de la PRV. Una vez abierta la válvula de seguridad los valores de presión calculados no se ajustan al comportamiento registrado durante el experimento; obsérvese que la presión calculada se mantiene prácticamente constante mientras que la registrada experimentalmente disminuye mucho más.

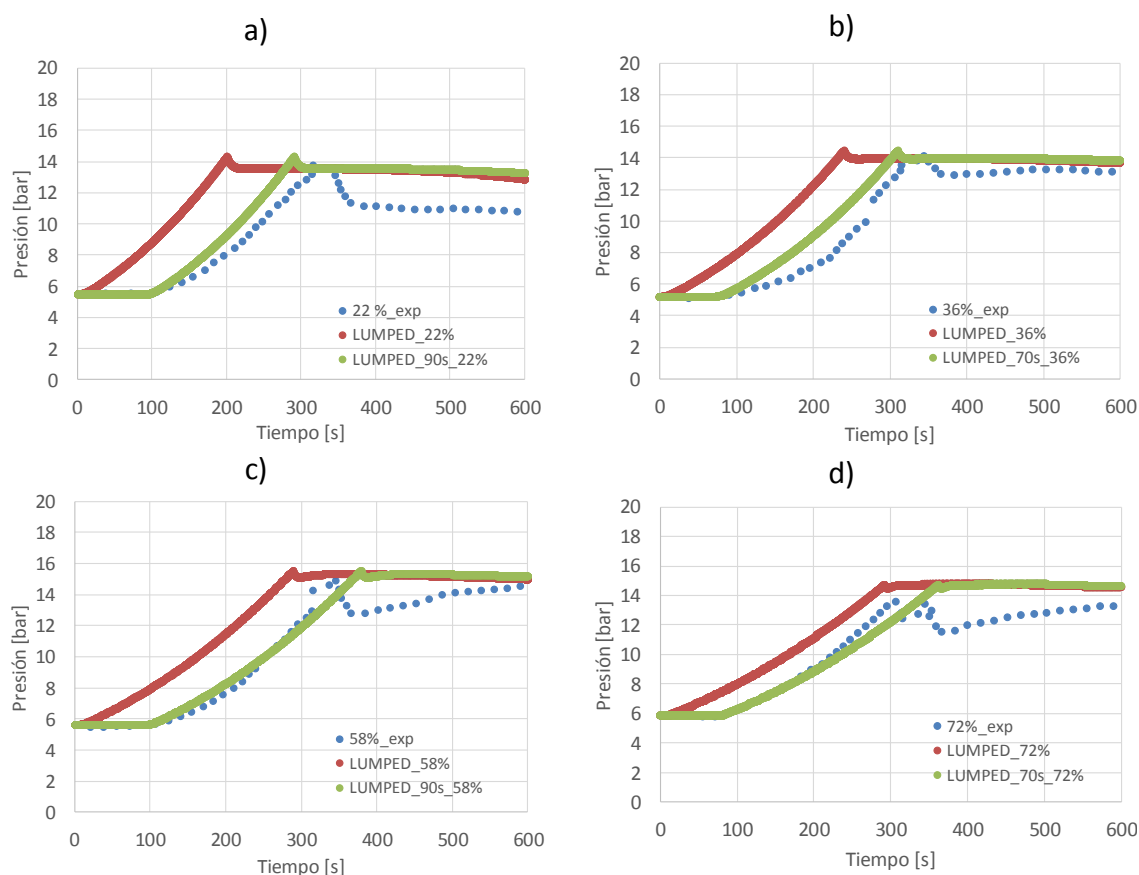


Figura 4.5. Curvas de presurización experimentales (en azul) y obtenidas con el modelo (en rojo y verde) para un depósito de 5 toneladas con distintos niveles de llenado: a) 22%; b) 36%; c) 58%; d) 72%. La serie de datos de color verde incorpora un desfase temporal de 70 s (36% y 72%) y 90 s (22% y 58%) respecto a la serie de datos roja.

El ajuste de los resultados experimentales con los calculados con el modelo para un tanque de 5 toneladas y un nivel de llenado del 36% (Figura 4.5b) es bastante fidedigno si se considera un tiempo de desfase de 70 s. Sin embargo, se observa una presurización más pronunciada en el modelo que en el experimento.

Las curvas de presurización obtenidas con el modelo computacional para un tanque de 5 toneladas y niveles de llenado del 58% y el 72% se muestran en las Figuras 4.5c y d. A pesar de que el modelo sobrepase el tiempo experimental para la presión de seguridad de la válvula, los resultados se consideran válidos. El modelo se adapta correctamente a la realidad durante los primeros tiempos de simulación. Sin embargo, a partir de un determinado instante la evolución de la presión experimental sufre un aumento en su tendencia que el modelo computacional no es capaz de reproducir. Esto puede venir dado porque llegado a un cierto momento, con unas ciertas condiciones en el líquido y el vapor, el modelo no contempla la posible variación drástica de alguna propiedad del sistema. Este cambio

puede venir dado porque el líquido llega a su temperatura máxima (temperatura de ebullición) y el comportamiento del fluido cambia.

La Figura 4.6 muestra los tiempos de obertura de la PRV para los ensayos experimentales realizados con un tanque de 5 toneladas respecto a los tiempos calculados con el modelo desarrollado y considerando su tiempo de desfase. También se comparan los resultados experimentales con los tiempos calculados con otro modelo de zonas (Zinnamosca, 2002).

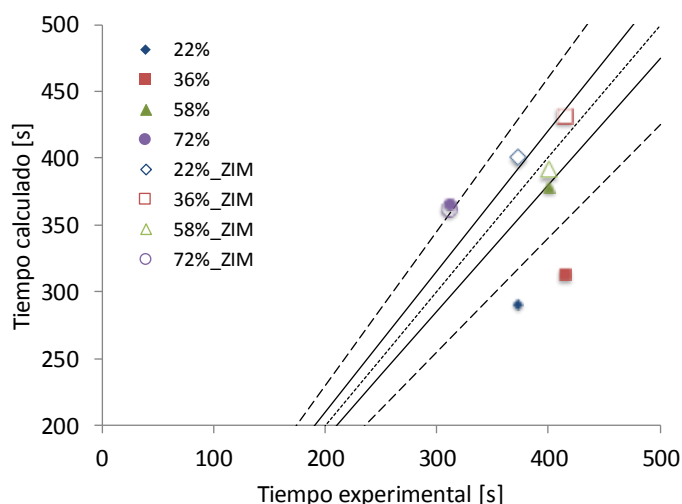


Figura 4.6. Tiempos de obertura de la válvula de alivio PRV obtenidos experimentalmente respecto a los calculados con el modelo de zonas desarrollado en este trabajo y con el modelo de Zinnamosca (2002) para un tanque de 5 toneladas y diferentes niveles de llenado. Línea de puntos: ajuste perfecto; línea sólida: $\pm 5\%$ de error; línea discontinua: $\pm 15\%$ de error.

Como se puede observar en la Figura 4.6, los valores calculados con el modelo propuesto en este trabajo presentan un error mayor del 15% para niveles de llenado del 22% y del 36%, e inferior a este valor para niveles del 58% y 72%. Los valores calculados con el modelo de Zinnamosca (2002) presentan errores inferiores o prácticamente iguales al 5%. La diferencia entre los resultados de Zinnamosca y los obtenidos mediante este modelo computacional puede ser debida, como se ha ido comentando anteriormente, a que el modelo computacional propuesto tiene una gran dependencia del líquido presente en el sistema.

Como en el caso del depósito de 1 tonelada, en la Figura 4.7 se presentan los resultados obtenidos para los caudales que intervienen en el sistema de 5 toneladas. En comparación al caso anterior, el calor que recibe el líquido, q_L , presenta mayores diferencias con los demás caudales térmicos. Esto viene dado por el volumen del sistema y, consecuentemente, por la cantidad total de líquido presente en el sistema.

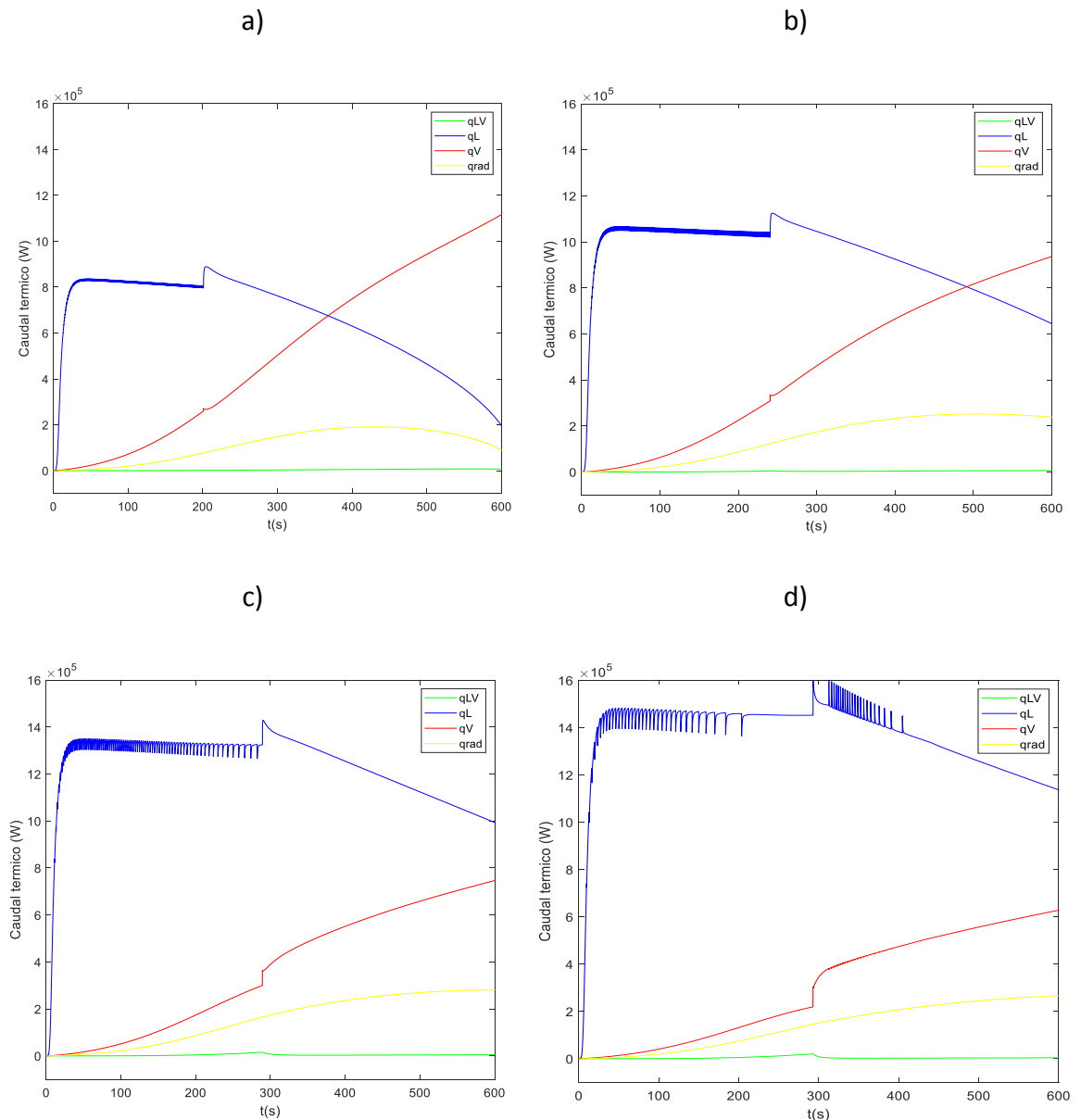


Figura 4.7. Curvas de caudales térmicos que intervienen en el sistema para un depósito de 5 toneladas con distintos niveles de llenado: a) 22%; b) 36%; c) 58%; d) 72%. Curvas sin tiempo de desfase.

Así pues, se identifica una clara dependencia entre la evolución de la presión y el nivel de llenado inicial. Para el depósito de 1 tonelada, conforme menor es el nivel inicial del tanque, mayor tiempo para llegar al valor de la presión de seguridad y para el depósito de 5 toneladas, la tendencia es la opuesta. Las siguientes figuras ayudan a identificar las principales diferencias entre los ensayos analizados.

Las Figuras 4.8 y 4.9 son las curvas de las temperaturas del líquido y del vapor obtenidas con el modelo computacional para el depósito de 1 tonelada y 5 toneladas, respectivamente. Por lo que respecta al tanque de 1 tonelada (Figura 4.8) las temperaturas del líquido alcanzan la misma temperatura final,

temperatura de ebullición, y las temperaturas del vapor sí que siguen en aumento alcanzando mayor temperatura conforme mayor cantidad de vapor en el depósito.

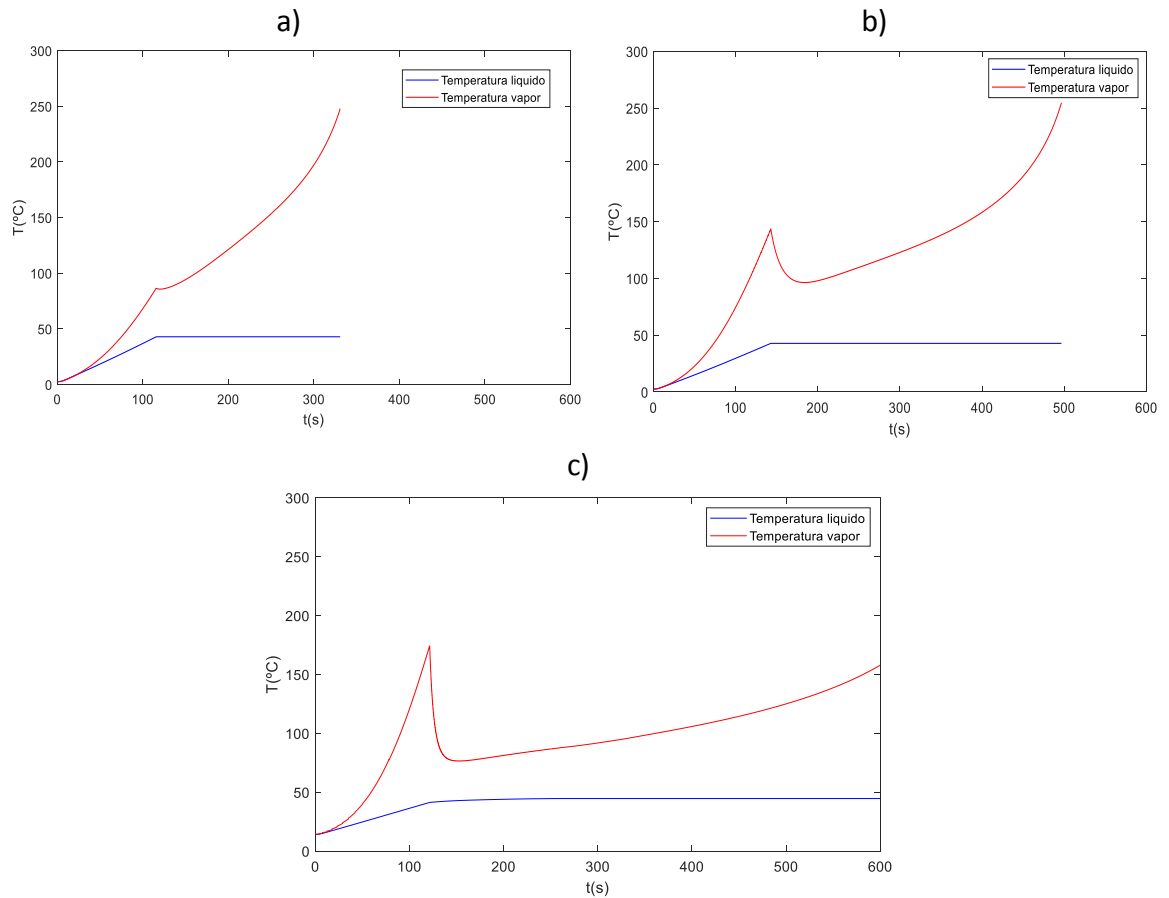


Figura 4.8. Curvas de la temperatura del líquido (azul) y temperatura del vapor (rojo) para el depósito de 1 tonelada con distintos niveles de llenado: a) 20%; b) 40%; c) 80%. Curvas sin tiempo de desfase.

Para la Figura 4.8a y 4.8b la simulación se acaba antes de llegar a 600 s como en el caso de la Figura 4.3. Se observan picos en la temperatura del vapor. Esto viene dado por la obertura de la válvula de seguridad, que provoca una disminución en la temperatura del vapor. Conforme menos volumen de líquido inicial, el pico es menos acentuado porque hay más cantidad de vapor en el sistema y la temperatura no disminuye tan drásticamente su valor.

Por lo que respecta a los resultados obtenidos de temperatura para el depósito de 5 toneladas (Figura 4.9), se obtiene la misma tendencia para la temperatura del líquido: en un momento determinado alcanza su temperatura de ebullición y esta se mantiene constante. La temperatura del vapor sigue aumentando conforme avanza el tiempo. También se observa que cuanto más volumen de líquido en el tanque, mayor disminución de la temperatura del vapor al abrirse la PRV.

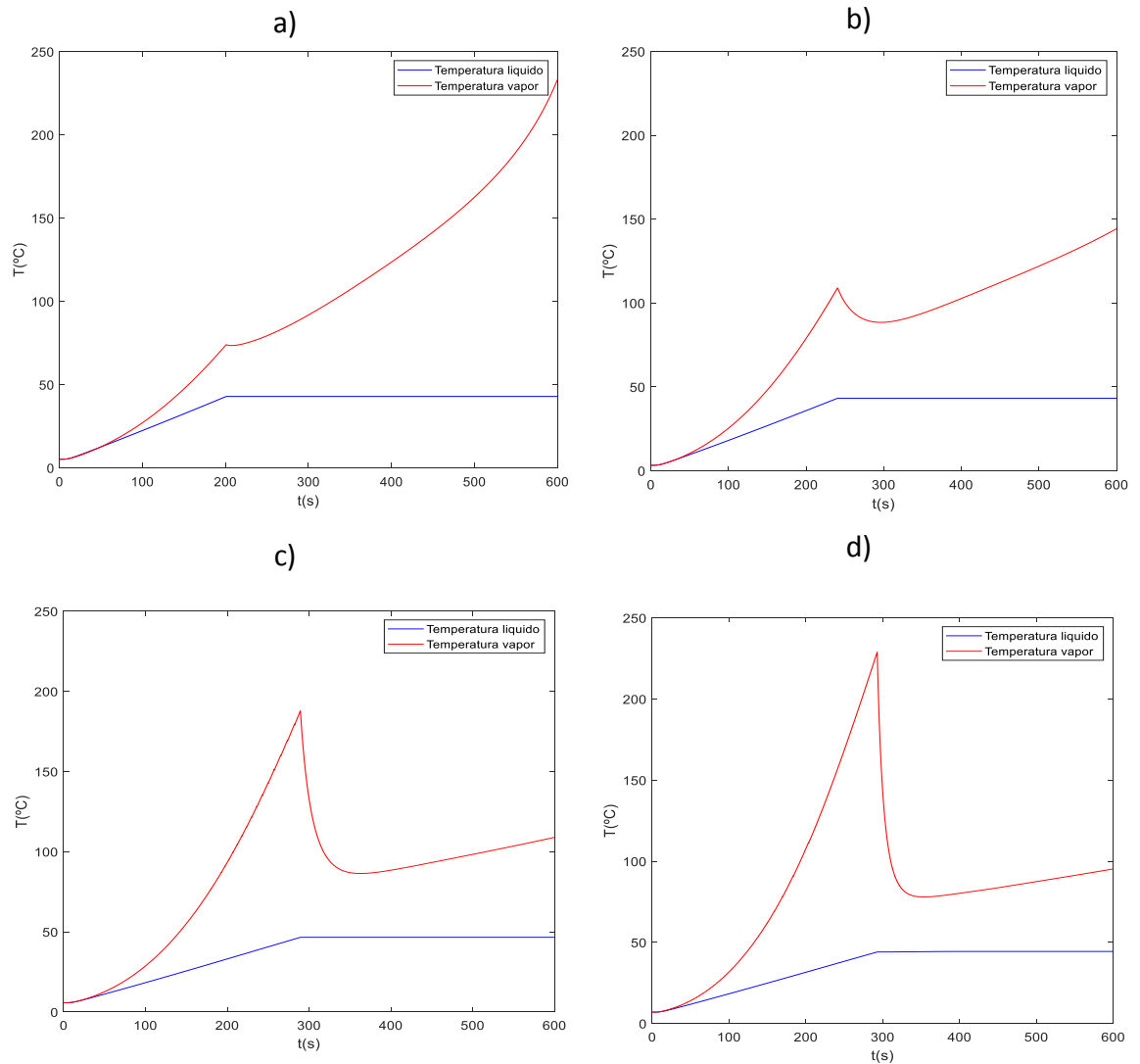


Figura 4.9. Curvas de la temperatura del líquido (azul) y temperatura del vapor (rojo) para el depósito de 5 toneladas con distintos niveles de llenado: a) 22%; b) 36%; c) 58%; d) 72%. Curvas sin tiempo de desfase.

A continuación, las Figuras 4.10 y 4.11 muestran la evolución de la masa de líquido del sistema para el depósito de 1 tonelada y 5 toneladas, respectivamente. La cantidad de líquido evaporado depende directamente del caudal térmico que afecta a éste y del calor latente del propano.

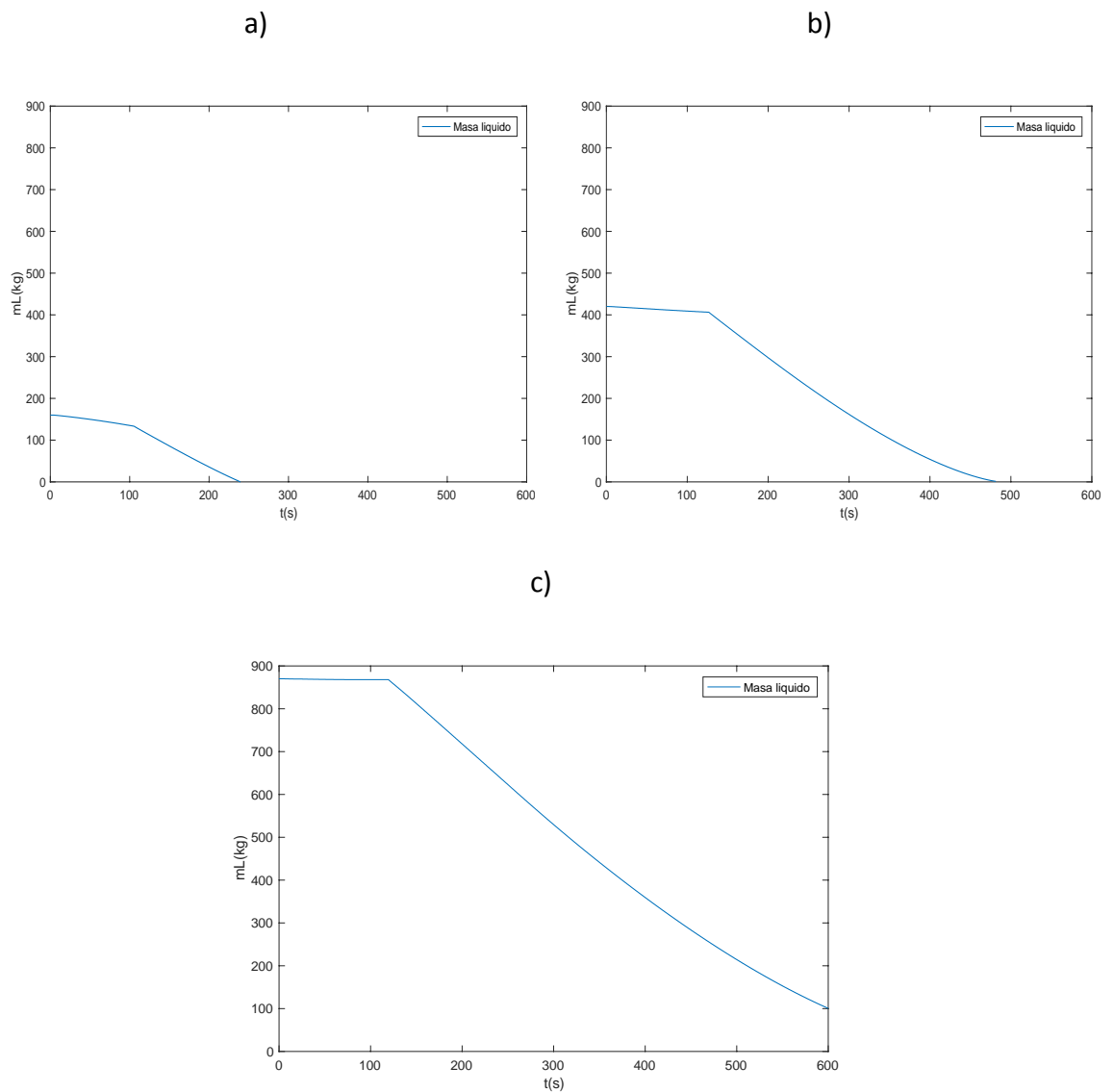


Figura 4.10. Evolución de la masa de líquido total para el depósito de 1 tonelada con distintos niveles de llenado: a) 20%; b) 40%; c) 80. Curvas sin tiempo de desfase.

Antes de la apertura de la válvula de seguridad la masa de líquido evaporada es pequeña, presentando casi una tendencia constante. Una vez abierta la PRV la tendencia cambia y aumenta la cantidad de propano líquido evaporado por segundo. Este viene dado porque una vez llegados a este punto, la energía aportada al sistema es utilizada únicamente para la evaporación del propano y no para la presurización del sistema.

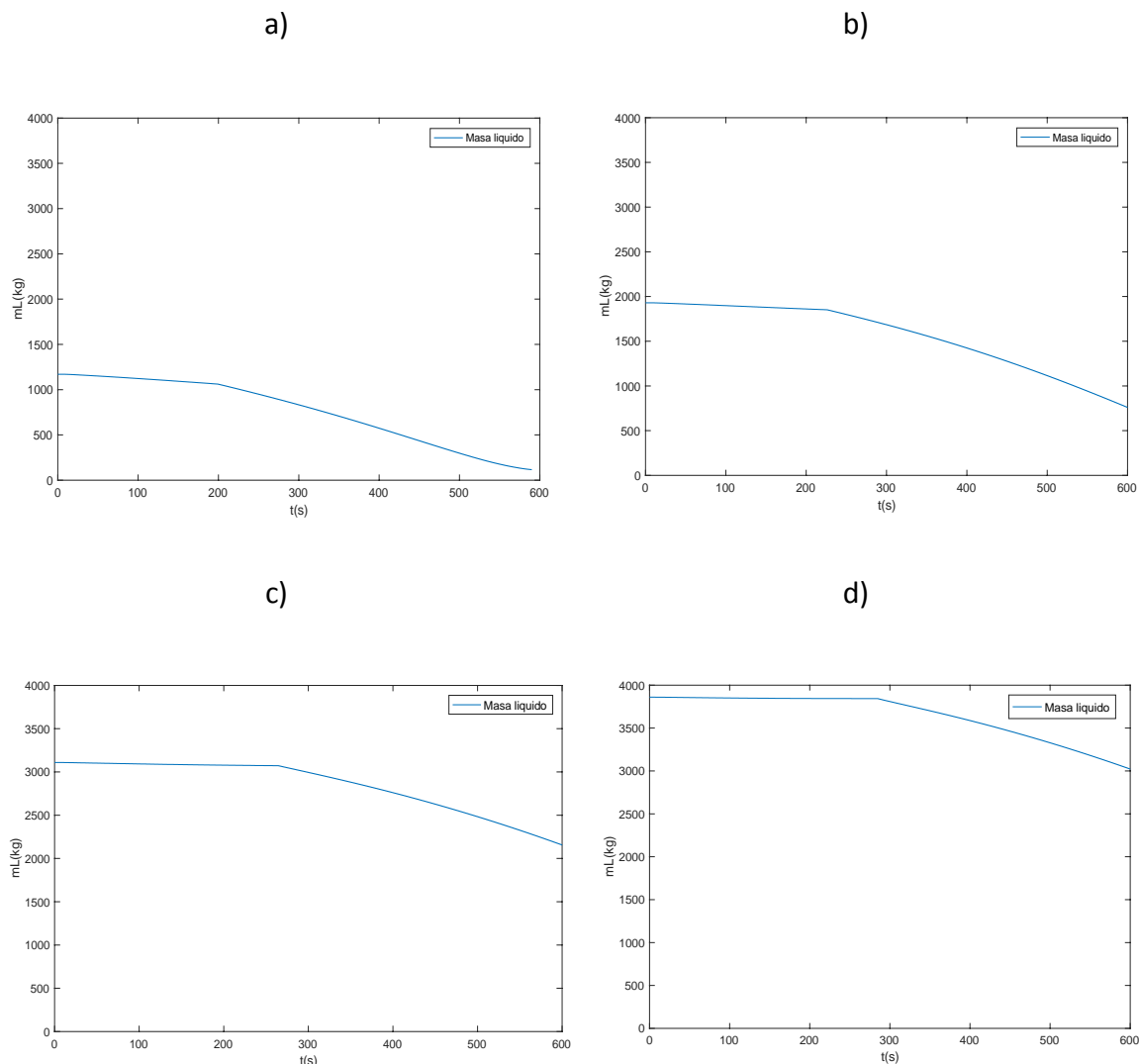


Figura 4.11. Evolución de la masa total de líquido para el depósito de 5 toneladas con distintos niveles de llenado: a) 22%; b) 36%; c) 58%; d) 72%. Curvas sin tiempo de desfase.

En el caso del depósito de 5 toneladas (Figura 4.11), la tendencia que sigue el propano líquido es la misma que para el caso anterior. Destacar que una vez abierta la válvula de seguridad la tendencia de evaporación del líquido es muy parecida en los cuatro casos.

4.2. Análisis de sensibilidad

El objetivo de este apartado es comprobar la precisión del modelo, modificando diferentes variables del sistema. El análisis del tiempo computacional permitirá observar la dependencia de los resultados con el tiempo de iteración definido, es decir, si el resultado final depende o no del tiempo

computacional de la simulación. Además, a partir de los resultados obtenidos en la validación, se ha creído importante hacer un estudio del nivel de llenado del tanque.

Por el hecho de querer analizar estas dos variables, se ha planteado un diseño factorial de 2 variables con 3 niveles de estudio. El estudio del tiempo computacional se enfoca a la verificación del modelo, dado que es la única variable que tiene que ser independiente del resultado final. Por lo que respecta al nivel de llenado, se enfoca más en analizar la importancia de esta variable y ver cómo afecta a los resultados.

Los resultados obtenidos en el apartado anterior con el tanque de 5 toneladas se adaptan correctamente a los resultados experimentales y, por lo tanto, serían aceptados. En consecuencia, en este análisis se utilizará el mismo tipo de tanque (5 toneladas) y las variables a modificar serán el tiempo computacional y el nivel de llenado. En la Tabla 4.4 se definen los valores de cada variable.

Tabla 4.4. Valores para las variables seleccionadas para la verificación

Input	Nivel 1	Nivel 2	Nivel 3
Paso temporal (s)	1	0,1	0,01
Nivel de llenado (%)	20	50	80

La elección de modificar el paso temporal de las iteraciones es debido a que es un sistema transitorio y cuanto menor sea su valor más tiempo de cálculo computacional será necesario para llevar a cabo la simulación y, consecuentemente, más precisión en los cálculos. El nivel de llenado se ha escogido porque es un modelo de zonas y este depende de las áreas del líquido y vapor, por lo tanto, es importante ver el efecto que tiene sobre el modelo.

Por lo que respecta a los demás inputs del sistema que no han sido nombrados, se resumen en la Tabla 4.5. Las propiedades del acero AISI 304 son las mismas que para la validación (véase la Tabla 3.3).

Tabla 4.5. Valor de las variables de entrada utilizadas en los ensayos realizados para el análisis de sensibilidad

Variable	Valor	Variable	Valor
Presión inicial [bar]	5,2	Presión seguridad PRV [bar]	14,3
Temperatura inicial [°C]	5	Área PRV [cm ²]	5

Para cada ensayo se ha medido el tiempo que ha tardado la válvula de seguridad en abrirse (Tabla 4.6). Para los ensayos realizados con el tanque al 20%, el tiempo transcurrido hasta la obertura de la PRV ha sido el mismo (195 s) independiente del valor asignado al intervalo de cálculo (1 s, 0,1 s o 0,01 s). Se puede concluir que el número de iteraciones no tiene un efecto notable para este nivel de llenado. Sin embargo, para los otros niveles de llenado se observan diferencias según el valor el tiempo computacional definido, siendo las diferencias más notables para el nivel de llenado del 80% (i.e. 261 s con 1 s, 286 s con 0,1 s y 287 s con 0,01 s).

Tabla 4.6. Tiempo de obertura de la PRV para las pruebas diseñadas para el análisis de sensibilidad

Intervalo de cálculo (s)	Nivel de llenado (%)	Tiempo obertura PRV (s)
1	20	195
1	50	256
1	80	261
0,1	20	195
0,1	50	257
0,1	80	286
0,01	20	195
0,01	50	257
0,01	80	287

También se ha comparado la evolución de otras propiedades del sistema (presión (P), temperatura del líquido (TL) y temperatura del vapor (TV)) (Figuras 4.12 y 4.13).

De la misma forma que se concluía con anterioridad, la Figura 4.12a muestra que las curvas de presurización son casi idénticas y que no existe una diferencia apreciable según el intervalo de cálculo para un nivel de llenado del 20%.

La tendencia de la curva de presurización para un nivel de llenado del 50% (Figura 4.12b) es la misma para los tres tiempos de cálculo y se asemejan bastante, pero se puede observar que el modelo tiene una tendencia escalonada cuando trabaja a 1 s. Cuando el nivel de llenado es del 80% la tendencia escalonada se aprecia más con un intervalo de cálculo de 1 s (Figura 4.12c), pero no se aprecia

diferencia alguna entre los tiempos computacionales de 0,1 s y 0,01 s. Por último, destacar que los resultados las curvas obtenidas con 0,1 s y 0,01 s se solapan (naranja para 0,1 s y gris para 0,01 s), por lo tanto, se puede considerar que con un intervalo de 0,1 s el modelo trabaja correctamente.

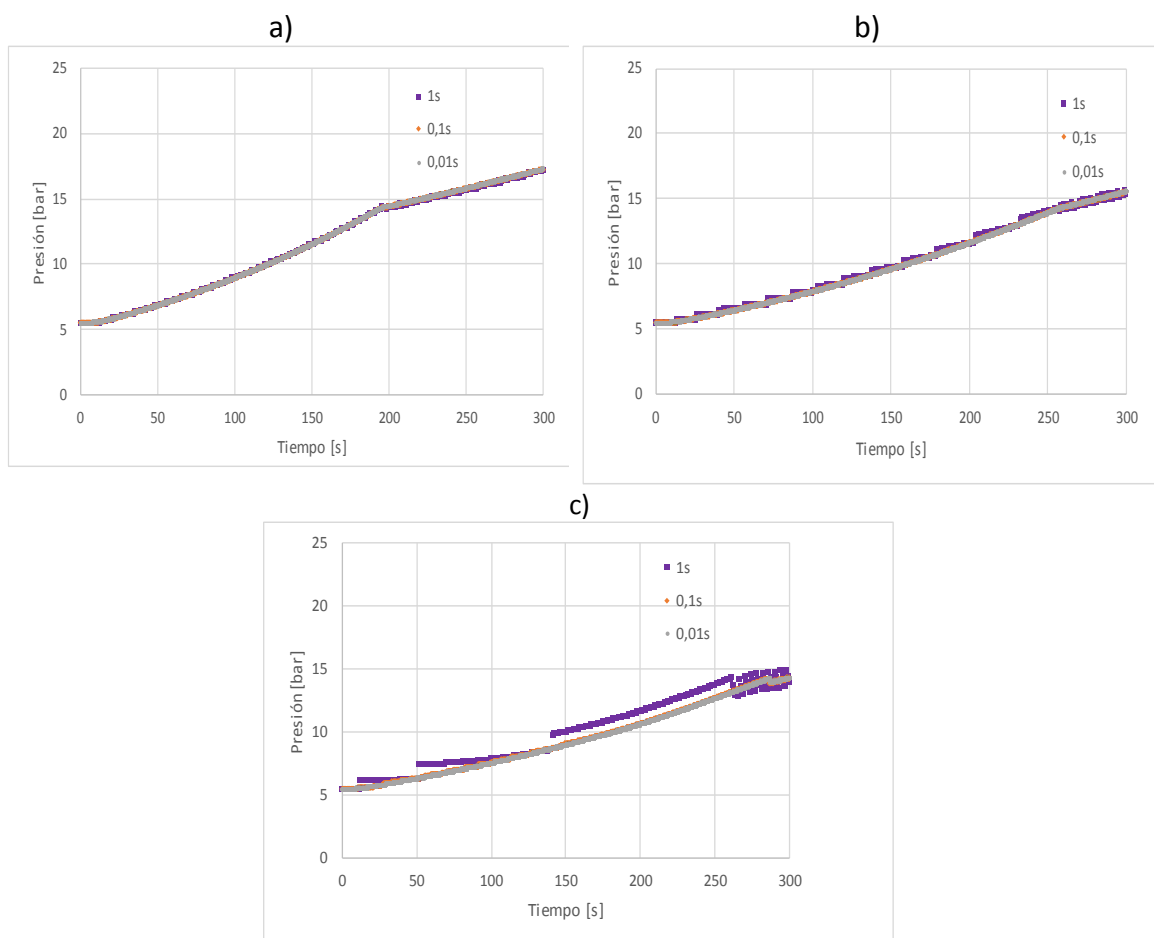


Figura 4.12 Curvas de presurización considerando 1 s, 0,1 s y 0,01 s como intervalos de cálculo en un tanque de 5 toneladas y distintos niveles de llenado: a) 20%; b) 50%; c) 80%

En la Figura 4.13 se pueden observar las temperaturas del líquido y del vapor. En el caso del líquido, su temperatura es independiente del nivel de llenado y del intervalo de cálculo. Por el contrario, en la temperatura el vapor se aprecian diferencias destacables en el caso del 80% de llenado, justo después de la apertura de la PRV los valores de la temperatura de vapor obtenidos para la simulación de 1 s tienen una tendencia diferente a las curvas obtenidas con 0,1 s y 0,01 s. Esto demuestra que los resultados obtenidos con un paso temporal de 1 s no son independientes del tiempo definido y, por lo tanto, el modelo computacional no compila de forma correcta con este paso temporal.

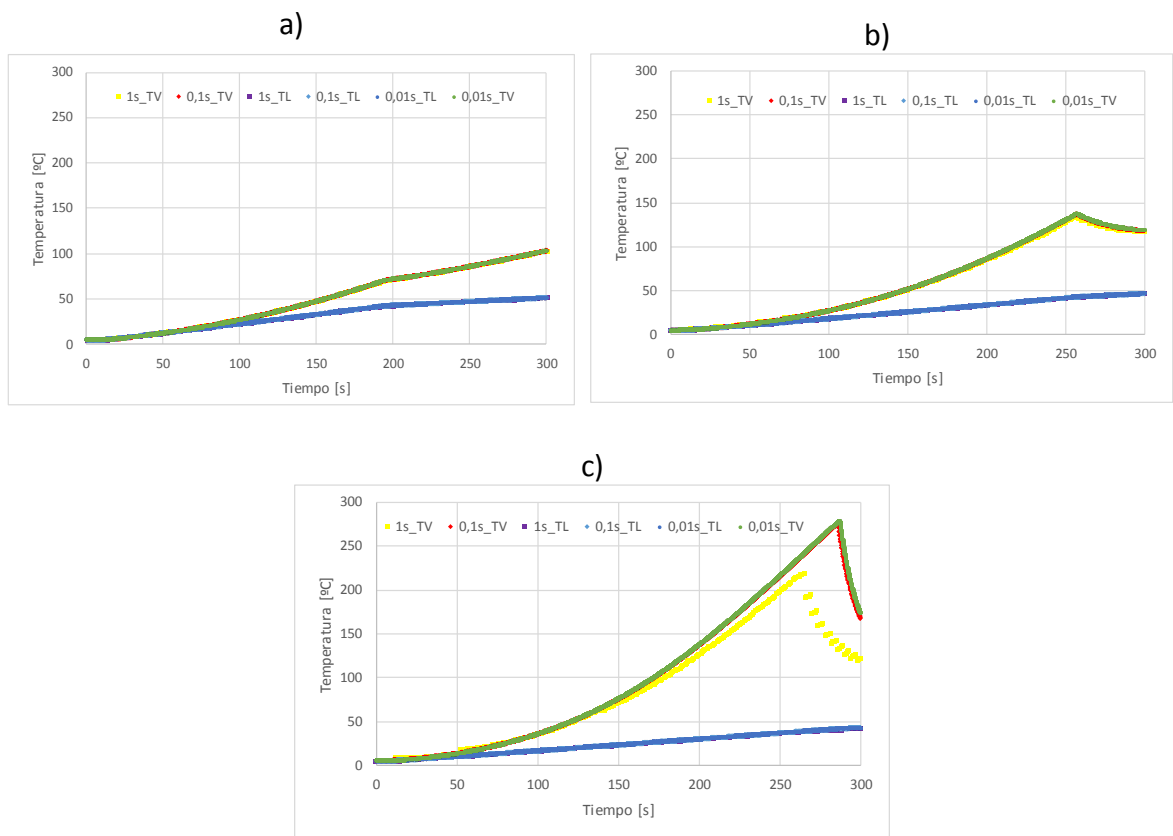


Figura 4.13. Evolución de la temperatura del líquido y del vapor considerando 1 s, 0,1 s y 0,01 s como intervalos de cálculo en un tanque de 5 toneladas y distintos niveles de llenado: a) 20%; b) 50%; c) 80%

Como con los gráficos de presurización, las curvas obtenidas con 0,1 s y 0,01 s se solapan, corroborando que los resultados obtenidos con un paso temporal de 0,1 s son independientes del tiempo definido.

Conclusiones

El modelo de zonas implementado reproduce el comportamiento dinámico de los fluidos (líquido y vapor) que se encuentran en el interior de un tanque de GLP.

Para un depósito de 1 tonelada (2 m^3), la presión del sistema presenta una evolución diferente a la de los ensayos experimentales, pudiendo concluir que el modelo no es capaz de reproducir la evolución del sistema para cantidades de producto de alrededor de 1 tonelada. En este tipo de situaciones el fluido sufre cambios drásticos en intervalos de tiempo muy pequeños, y el modelo no es capaz de reproducirlos exactamente. En cambio, para un depósito de 5 toneladas (10 m^3), los resultados obtenidos con el modelo pueden considerarse válidos. Hay que destacar, sin embargo, que se tiene que considerar un desfase temporal de alrededor de 1 minuto y medio, en ambos casos, para que el ajuste entre modelo y datos experimentales sea más adecuado. Según estos resultados, cabe esperar un buen comportamiento del modelo para volúmenes de tanque superiores a los estudiados, debido a que los cambios que sufriría el sistema serían más graduales para estos volúmenes.

A partir de los resultados obtenidos, se concluye que este modelo computacional es válido para tanques de 5 toneladas (en las condiciones iniciales reportadas en este trabajo). Sin embargo, el rango de volúmenes para tanques de GLP en interfaces urbano-forestales se encuentra entre 1 m^3 y 13 m^3 . Por lo tanto, el modelo no se ajustaría a todos los posibles casos reales y sería necesario el uso de herramientas CFD, ya que son capaces de reproducir los cambios que sufre el fluido en intervalos de tiempo muy pequeños.

Como posible trabajo para el futuro, se podría plantear la validación del modelo para tanques de mayor volumen, dado que la evolución del sistema en este caso sería más progresiva. También podría utilizarse el modelo implementado para el estudio de otros escenarios de fuego, como por ejemplo, que las llamas sólo toquen parcialmente al tanque o por contacto indirecto.

Análisis del impacto ambiental

Cabe destacar que el impacto ambiental de un incendio, además de la posible contribución de varias toneladas de propano, puede ser muy elevado, ya sea por accidente o por experimentación. Dado que este proyecto se basa en la implementación de un modelo computacional y es un trabajo teórico, únicamente, se tendrá en cuenta el impacto ambiental de los recursos utilizados para la generación de esta memoria.

Para la ejecución del proyecto se ha utilizado material de oficina, además, del consumo eléctrico referente al PC y la climatización del espacio de trabajo. Gran parte del proyecto se ha llevado a cabo en las instalaciones del CERTEC (Centro de Estudios del Riesgo Tecnológico), localizado en el Departamento de Ingeniería Química de la EEBE (Escuela de Ingeniería Barcelona Est).

Por lo que respecta al material de oficina, la facultad de la EEBE trabaja por una correcta y responsable gestión de los residuos de papel y plástico, facilitando espacios para su reciclaje. Igualmente, es importante tener en cuenta el uso de este tipo de recursos, debido al gran consumo y, consecuentemente, el gran impacto ambiental que tiene su producción en masa.

El otro impacto ambiental, es la generación de emisiones de gases de efecto invernadero a partir del consumo eléctrico. Para la cuantificación de las emisiones se ha considerado la generación de CO₂ equivalente, el cual vendrá dado por el consumo del PC y el tiempo total de trabajo.

Teniendo en cuenta, que para la realización del proyecto se han necesitado 300 horas y que el consumo medio de un ordenador de mesa encendido es de 220 W, mediante la herramienta Cero CO₂, disponible en la red de red de forma gratuita (<<Cero CO₂ - Actuamos frente al Cambio Climático>>). Las emisiones para la generación de la memoria son 24,82 kg de CO₂ eq.

Presupuesto y/o Análisis Económico

Los costes de este proyecto se dividen en dos bloques: costes asociados al personal y costes relativos al material empleado.

Costes de personal

Para el coste asociado al personal hay que tener en cuenta las personas que han participado en el proyecto y el tiempo invertido para su realización.

El proyecto ha sido realizado por una única persona con titulación de ingeniero químico. Y la revisión y corrección por dos doctoras ingenierías industriales. Para cada categoría se asigna un valor aproximado de mano de obra [€/h] y teniendo en cuenta las horas de cada persona se puede obtener el coste económico asociado al personal. La Tabla 1 resume los costes de los recursos humanos que han intervenido.

Tabla 1. Desglose económico de los recursos personales invertidos en el proyecto

Personal	Salario [€/h]	Tarea desempeñada	Horas invertidas	Coste [€]
Ingeniero Químico Junior	12	Estudio bibliográfico Trabajo modelo computacional Simulación Elaboración de la memoria	300	3.600
Doctora Ingeniera Industrial	40	Orientación y revisión de la memoria	10	400
Doctora Ingeniera Química	40	Orientación y revisión de la memoria	15	600
TOTAL			325	4.600

Costes del material

Dado que el proyecto se ha elaborado en el grupo de investigación CERTEC (Centro de Estudios del Riesgo Tecnológico) todos los recursos materiales empleados están asociados a sus instalaciones. Para la realización del proyecto se han utilizado dos ordenadores: uno perteneciente al grupo de investigación (Microsoft Windows 7 Professional) y el otro de uso particular (MacBook), en el caso del ordenador de mesa (Windows) se considera que el tiempo medio de obsolescencia es de 5 años y el portátil personal (MacBook) tiene 7 años. Para llevar a cabo las simulaciones se ha utilizado el programa MATLAB, del cual es necesaria la adquisición de una licencia para trabajar. Y también, hay que tener en cuenta el paquete de Microsoft Office. La Tabla 2 recoge los costes de los materiales empleados para el proyecto.

Tabla 2. Desglose económico asociado a los costes materiales del proyecto

Categoría	Cantidad	Coste unitario [€]	Coste [€]
PC	2	1000	342,86
MATLAB Student	1	69	69
Microsoft Office	2	250	500
TOTAL			911,86

Costes totales

A continuación, se muestran los costes totales asociados a la realización del proyecto:

Tabla 3. Costes totales del proyecto

Tipo de coste	Coste [€]
Personal	4.600
Material	911
TOTAL	5.511,86

Bibliografía

Aenor, Asociación Española de Normalización y Certificación, 2008. UNE 60250: instalaciones de almacenamiento de gases licuados del petróleo (GLP) en depósitos fijos para su consumo en instalaciones receptoras.

Anderson, C., Townsend, W., Zook, J., Cowgill, G. The effects of a fire environment on a rail tank car filled with LPG. *US Dept. Trans. Rept No FRA-DOT*, p 31-75.

Aydemir, N.U., Magapu, V. K., Sousa, A. C. M., Venart, J. E. S., 1988. Thermal response analysis of LPG tanks exposed to fire. *Journal of Hazardous Materials*. Elsevier Science Publishers, no 20, p. 239-262.

Beyon, G.V., Cowley, L. T., Small, L. M., Williams, I., 1988. Fire engulfment of LPG tanks: Heatup, a predictive model. *Journal of Hazardous Materials*. Elsevier Science Publishers, no 20, p. 227-238.

Bi, M., Ren, J., Zhao, B., Che, W. 2011. Effect of fire engulfment on the thermal response of LPG tanks. *Journal of Hazardous Materials*. Elsevier, no 192, p 874-879.

Birk, A. M. (1998). *Development and validation of a mathematical model of a rail tank-car engulfed in fire* (tesis doctoral). Univerdad Queen, Kingston, Ontario, Canada.

Birk, A.M., Poirer, D., Davison, C., 2005. On the response of 500 gal propane tank to 25% engulfing fire. *Journal of Loss Prevention in the process industries*. Elsevier, no 19, p 527-541.

Birk, A.M., VanderSteen, J. D. J, 2006. On the thermal rupture of 1.9m³ propane vessels with defects in their thermal protection system. *Journal of Loss Prevention in the process industries*. Elsevier, no 19, p 582-597.

Bubbico R., Mazzarotta, B., 2017. Dynamic response of a tank containing liquefied gas under pressure exposed to fire: A simplified model. *Process Safety and Environmental Protection*. Elsevier, no 113, p 242-254.

Casal, J., 2008. Evaluation of the effects and consequences of major accidents in industrial plants. ISBN 9780444638830.

Chen, H., Lin, M., Chao, F., 1999. Thermal Response Analyses of Spherical LPG Storage Tank. *Journal of Chemical Engineering of Japan*. Vol.1, no 1, p 153-157.

Dancer, D., Sallet, D. W., 1990. Pressure and temperature response of liquefied gases in containers and pressure vessels which are subjected to accidental heat input. *Journal of Hazardous Materials*. Elseiver, vol. 25, p 3–18.

Graves, K. W., 1973. Development of a Computer Model for Modelling the Heat Effects on a Tank Car.

Hunt, D. L. M., Ramskill, P.D., 1985. The behaviour of tanks engulfed in fire – The development of a computer program. *IChemE*. Symposium Series, no 93, p. 71-86.

Johnson, M. R., 1998. Tank car thermal analysis, volume 2, technical documentation report for analysis program, DOT/FRA/ORD-98/09B. *Washington DC: US Department of Transportation, Federal Railroad Administration*.

Knudsen, J. G. et al., 1999. Heat and mass transfer, Section 5. *Perry's Chemical Engineers' Handbook* McGraw-Hill 7^o Edition.

Landucci, G., Cozzani, V., Birk, A. M., 2013. Heat Radiation Effects, Section 5. *Domino Effects in the Process Industries. Modelling, Prevention and Managing*. Elseiver.

Landucci, G., D'Aulisa, A., Tugnoli, A., Cozzani, V., Birk, A.M., 2016. Modeling heat transfer and pressure build-up in LPG vessels exposed to fires. *International Journal of Thermal Science*. Elseiver, no 104, p 228-244.

Landucci, G., Molag, M., Cozzani, V., 2009. Modeling the performance of coated LPG tanks engulfed in fires. *Journal of Hazardous Materials*. Elseiver, no 172, p 447-456.

Landucci, G., Molag, M., Reinders, J., Cozzani, V., 2009. Experimental and analytical investigation of the thermal coating effectiveness for 3m³ tanks engulfed by fire. *Journal of Hazardous Materials*. Elseiver, no 161, p 1182-1192.

Manda, L. J., 1973. Phase 11 Report on Analysis of 1/5 scale Fire Test, Report No. RA-11-5-26. Chicago, IL.

Moodie, K., Billinge, K., Cutler, D. P., 1982. The Fire Engulfment of LPG storage tanks. *IChemE*. Symposium Series, no 93, p 87-106.

Moodie, K., Cowley, L.T., Denny, R. B., Small, L. M., Williams, I., 1988. Fire Engulfment test on a 5 tonne LPG tank. *Journal of Hazardous Materials*. No 20, p 55-71.

Ramskill, P.D., 1988. A description of the “ENGULF” computer code – Codes to model thermal response of an LPG tank either fully or partially. *Journal of Hazardous Materials*. Elsevier Science Publishers, no 20, p. 177-196.

Salzano E., Picozzi, B., Vaccaro, S., Ciambelli, P., 2003. Hazard of Pressurized Tanks Involved in Fires. *Ind. Eng. Chem. Res.*, no 42, p. 1804-1812.

Scarponi, G. E. (2018). *Experimental and analytical investigation of pressurized vessels exposed to fire* (tesis doctoral). Universidad de Bolonia, Italia.

Scaporni, G. E., Landucci, G., Heymes, F., Cozzani, V., 2018. LPG vessels exposed to fire: Scale effects on pressure build-up. *Journal of Loss Prevention in the process industries*. Elsevier, no 56, p 342-358.

Shebeko, Y. N., Bolodian, I. A., Filippov, V. N., Navzenya, V., Kostyuhin, A. K., Tokarev, P. M., Zamishevski, E. D., 2000. A study of the behaviour of a protected vessel containing LPG during pool fire engulfment. *Journal of Hazardous Materials*. Elsevier, A77, p. 43-56.

Users Manual For AFTAC 4.00. RSI-AAR Railroad Tank Car Safety Research & Test Project, 2006.

Valiente, A., Gómez, S., 2016. How to calculate the volumes of partially full tanks. *International Journal of Research in Engineering and Technology*. Volume 5.

Zinnamosca, A. (2002). *Studio dell' esplosione BLEVE: modellizzazione dinamica del comportamento di serbatoi per gas liquefatti esposti ad incendi* (tesis de doctoral). Universidad La Sapienza, Roma, Italia.

Anexo A

Los flujos y caudales térmicos que intervienen en el tanque afectado por un incendio se definen mediante los tres fenómenos de transporte de calor: conducción, convección y radiación. A continuación, se desglosa la explicación por etapas desde fuera del tanque hacia su interior, definiendo las ecuaciones para cada etapa y su nomenclatura para el código computacional.

Antes de empezar a definir las ecuaciones es importante conocer cómo se expresan algunos números adimensionales y qué tipo de relaciones existen entre ellos para el cálculo de los coeficientes de convección (Tabla A.1).

Tabla A.1. Definición números adimensionales para la definición del coeficiente de convección

Nombre	Ecuación
	$Nu = c (Gr \cdot Pr)^n \quad (ec. 28)$
Nusselt (Nu)	$Nu = \frac{h_{CN} \cdot L_c}{k} \quad (ec. 29)$
Rayleigh (Ra)	$Ra = Gr \cdot Pr \quad (ec. 30)$
Grashof (Gr)	$Gr = \frac{g \cdot \beta \cdot \rho^2 \cdot L_c^3 \cdot \Delta T}{\mu^2} \quad (ec. 31)$
Prandtl (Pr)	$Pr = \frac{\mu \cdot Cp}{k} \quad (ec. 32)$
Reynolds (Re)	$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot L_c}{\mu} \quad (ec. 33)$
Longitud característica (Lc)	$L_c = \frac{\text{Volumen tanque}}{\text{Área superficial}} \quad (ec. 34)$

Transferencia de calor a la pared exterior del tanque

El intercambio térmico entre la superficie externa del tanque y el fuego viene dado, como se ha comentado anteriormente, por convección y radiación, según el tipo de incendio. Para el caso de “total engulfment” se tienen en cuenta ambas contribuciones (Moodie et al., 1982). La ecuación resultante de desarrollar y combinar las ecuaciones de convección y radiación permite definir el calor incidente en las superficies externas del tanque de la siguiente manera:

$$q_{IN} = \sigma \varepsilon_S (\varepsilon_f T_f^4 + (1 - \varepsilon_f) T_{amb}^4 - T_s^4) + h_f (T_f - T_s) \quad (ec. 35)$$

La ecuación 22 permite calcular el flujo de calor suponiendo una temperatura de la llama. Donde:

σ	Constante de Stefan-Boltzmann, $5,67 \cdot 10^{-8}$ [W/m ² ·K ⁴]
T_{amb}	Temperatura ambiente [K]
T_f	Temperatura de la llama [K]
T_s	Temperatura de la pared [K]
ε_S	Emisividad de la pared (0,9 para el caso del acero)
ε_f	Emisividad de la llama (0,9, según Birk et al. (2000))
h_f	Coeficiente de convección de la llama [W/m ² ·K] (22 W/m ² ·K, Landucci (2016))

Transferencia de calor a través de la pared

Para el fenómeno de conducción se aplica la ecuación de Fourier con la expresión unidimensional en coordenadas cartesianas. Destacar que no se tiene en cuenta una conducción axial a través de la pared, porque la diferencia de tamaños entre el diámetro y el espesor es muy grande para poder considerarse.

El flujo de conducción a través de la pared define de la siguiente manera:

$$q_x = \frac{k}{\delta} (T_1 - T_2) \quad (ec. 36)$$

Siendo k la conductividad térmica del sólido [W/m·K], δ el espesor del tanque en m y $(T_1 - T_2)$ el gradiente de temperaturas, siempre con diferencia positiva.

Transferencia de calor de la pared al fluido

La pared del tanque cede calor en forma de convección al vapor y al líquido, a través de sus respectivas superficies en contacto (A_L , A_V). Al mismo tiempo, debido a la alta temperatura de la pared en contacto con el vapor, el líquido también se ve calentado por el fenómeno de radiación.

- **Zona ocupada por el vapor**

Hay que tener en cuenta que se pueden dar dos posibles situaciones, según si la válvula de seguridad se encuentra cerrada o abierta. Si la válvula está cerrada se considerará convección natural y en el caso que la válvula se encuentre abierta, porque la presión del interior del tanque ha llegado a la presión de seguridad, se establecerá un flujo convectivo forzado.

Para el caso de convección libre o natural se aplicará la siguiente ecuación para el cálculo del coeficiente de convección, Knudsen (1999):

$$h_v = (0,27Ra^{0,25}) \frac{k_v}{L_v} \quad (ec. 37)$$

Siendo Ra el número adimensional Rayleigh, k_v la conductividad térmica del vapor [W/m·K] y L_v la longitud característica de la zona ocupada por el vapor.

Y para el caso de convección forzada, el coeficiente de convección para el vapor se define mediante la siguiente correlación, Knudsen (1999):

$$h_v = (0,024Re^{0,8}Pr^{0,4}) \frac{k_v}{L_v} \quad (ec. 38)$$

Para este tipo de situación, es necesario conocer los números adimensionales Reynolds (Re) y Prandtl (Pr), definidos en la Tabla A.1. Así el flujo térmico de la pared al vapor puede calcularse según la siguiente ecuación:

$$q_v = A_{V_int} h_v (T_{SV} - T_V) \quad (ec. 39)$$

Siendo A_{V_int} el área de la pared en contacto con el vapor, h_v el coeficiente de convección correspondiente, T_{SV} la temperatura de la pared interior y T_V la temperatura del vapor.

- **Zona ocupada por el líquido**

Convección

Para un líquido subenfriado existe una curva típica de ebullición. La situación en la que se encuentre el líquido dependerá del flujo de calor entre la pared y el fluido. La etapa en la que se encuentre el líquido subenfriado dependerá de la temperatura de la pared y la temperatura de saturación del líquido.

La expresión utilizada para el cálculo del flujo de calor será la siguiente:

$$q_L = A_{L_int} h_L (T_{SL} - T_L) \quad (ec. 40)$$

Siendo A_{L_int} el área de la pared en contacto con el líquido en m^2 , h_L el coeficiente de convección correspondiente [$W/m^2 \cdot K$], T_{SL} la temperatura de la pared interior en contacto con el líquido [K] y T_L la temperatura del líquido [K].

Dependiendo de la etapa en que se encuentre el líquido, se definirá un coeficiente de convección (h_L) con una relación adimensional u otra. A continuación, se definen las 3 etapas que se pueden llegar a dar:

1. Convección natural

En los inicios del calentamiento del tanque, pared y líquido intercambian calor debido a su gradiente de temperaturas, pudiéndose definir el coeficiente de convección a partir de una correlación para planos horizontales, Knudsen (1999):

$$h_L = 0.14 Ra^{\frac{1}{3}} \frac{k_l}{L_l} \quad (ec. 41)$$

Siendo Ra , el número adimensional Rayleigh, L_l la longitud característica del líquido y k_l la conductividad térmica del líquido [$W/m \cdot K$].

2. Nucleación

Cuando la transferencia de calor mediante convección natural no sea capaz de transferir todo el calor recibido y siga en aumento, entonces, empezarán a aparecer burbujas en la superficie de la pared. Estas burbujas se alejan de la pared para dirigirse a la superficie del líquido, donde la temperatura es menor, cuando las burbujas llegan a la superficie acaban condensando por falta de energía.

El coeficiente de convección del líquido en este caso se define según la siguiente ecuación (Knudsen, 1999):

$$h_L = 3,75 \cdot 10^{-5} \cdot P_{crit}^{0.69} \cdot (T_L - T_{boil})^{0.7} \cdot \left(1,8 \cdot \left(\frac{P}{P_{crit}} \right)^{0.17} + 4 \cdot \left(\frac{P}{P_{crit}} \right)^{1.2} + 10 \cdot \left(\frac{P}{P_{crit}} \right)^{10} \right)^{1/0.3} \quad (ec. 42)$$

Donde:

P presión del sistema [Pa]

P_{crit} presión crítica del propano [Pa]

T_L temperatura del líquido [K]

T_{boil} temperatura de ebullición del propano a la presión del sistema [K]

3. Transición y estabilidad de la película de ebullición

Si el flujo de calor hacia el líquido sigue aumentando, habrá un aumento en la generación de burbujas hasta llegar a un punto crítico donde se forma una capa de vapor estable entre el líquido y la pared.

Zinnamosca (2018) hace referencia a que el flujo generado por un charco de hidrocarburos no es suficiente para alcanzar el flujo crítico del propano y provocar la etapa de estabilidad de la película de ebullición. Por lo tanto, solo se tendrán en cuenta las etapas de convección natural y de nucleación.

Radiación

La diferencia de temperaturas entre el líquido y la pared interior en contacto con el vapor da lugar a que el líquido se caliente por radiación. La Figura A.1 esquematiza las dos superficies en términos diferenciales (dA_1 : pared interior en contacto con el vapor; dA_2 : superficie del líquido) para el cálculo del factor de vista de la pared a la superficie del líquido.

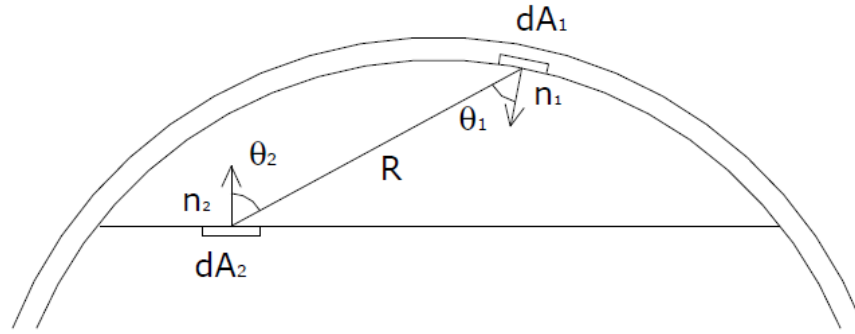


Figura A.1. Representación de superficies diferenciales involucradas en el intercambio de calor por radiación en el interior del tanque

Obteniéndose, la siguiente relación:

$$F_{1-2} = \frac{1}{A_1} \int_{A_1} \int_{A_2} \frac{\cos\theta_1 \cdot \cos\theta_2}{R} dA_2 dA_1 \quad (ec. 43)$$

Resultando para el caso estudiado:

$$F_{w-L} = \frac{\sin\left(\arccos\left(\frac{L-R_i}{R_i}\right)\right)}{\arccos\left(\frac{L-R_i}{R_i}\right)} \quad (ec. 44)$$

Siendo L el nivel del depósito [m] y R_i el radio interior del tanque [m].

El caudal por radiación que recibe el líquido viene dado por la siguiente ecuación,

$$q_R = \frac{\sigma \cdot (T_{SV}^4 - T_L^4)}{\frac{1 - \varepsilon_s}{\varepsilon_s \cdot A_{V_{int}}} + \frac{1}{A_{V_{int}} \cdot F_{w-L}} + \frac{1 - \varepsilon_L}{\varepsilon_L \cdot A_{L_{int}}}} \quad (ec. 45)$$

La ecuación ha sido extraída del Users Manual for AFFTAC (2006) y tiene unidades de kW. Donde:

- σ Constante de Stefan-Boltzmann ($5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$)
- T_{SV} Temperatura de la pared en contacto con el vapor [K]
- T_L Temperatura del líquido [K]
- ε_s Emisividad de la pared (0,9 para el acero)

ε_L Emisividad del líquido (0,9 según Birk et al. (2000))

A_{V_int} Área interior de la pared del tanque en contacto con el vapor

A_L Área interior de la pared del tanque en contacto con el líquido

F_{w_L} Factor de vista de la pared al líquido

Transferencia de calor entre el vapor y el líquido

Al considerar un estado de no equilibrio térmico entre ambos fluidos, se define la formación de una capa líquido-vapor.

El caudal térmico entre fluidos se define de la siguiente manera:

$$q_{LV} = A_{LV} h_{LV} (T_V - T_L) \quad (ec. 46)$$

Siendo A_{LV} el área de la interfaz entre el líquido y el vapor [m^2], h_{LV} el coeficiente de convección entre el líquido y el vapor [$W/m^2 \cdot K$], T_V la temperatura del vapor [K] y T_L la temperatura del líquido [K].

El coeficiente de convección es el mismo que para el caso de convección natural en la fase vapor, pero en el cálculo de los números adimensionales hay que tener en cuenta la variación en la definición de la longitud característica y el área de la capa líquido-vapor, la cual dependerá directamente del nivel del tanque.

Anexo B

En este apartado, se describen las ecuaciones para la definición de las áreas del tanque. Como ya se ha dicho, se estudia un tanque cilíndrico sin cabezales semiesféricos, para reducir la complejidad del modelo computacional. La Figura B.1 muestra el desglose del tanque en 3D y la vista en planta del depósito.

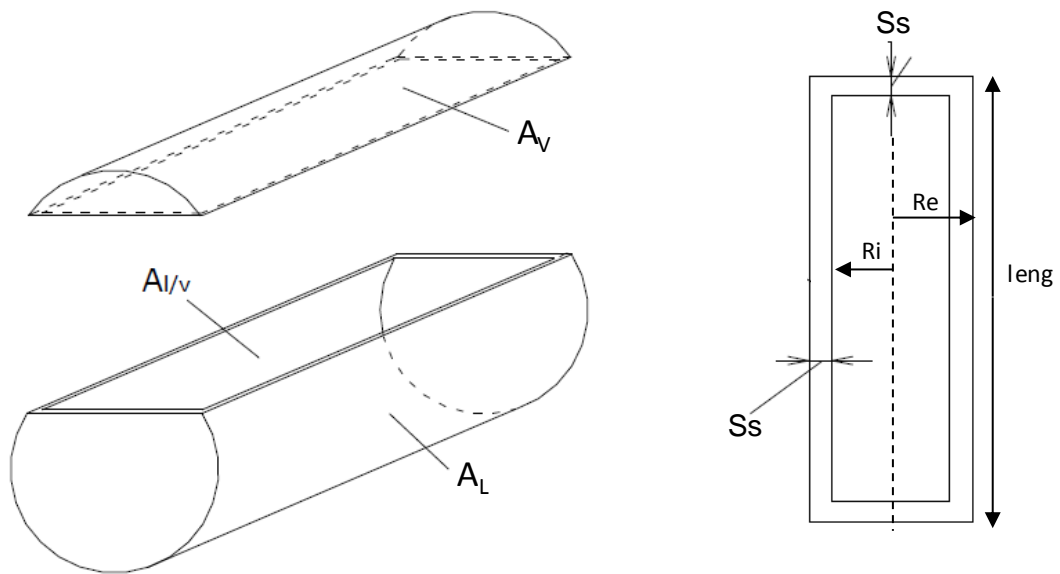


Figura B.1. Desglose tanque cilíndrico para cálculo de las áreas

En la Figura B.1 solo se diferencia una sola capa de espesor, el modelo computacional trabaja con un área externa y otra interna, debido a la división del espesor en dos. Por lo tanto, las ecuaciones descritas a continuación, sí que tienen en cuenta la doble capa, la cual se ve reflejada en el valor del radio (R_i y R_e). Antes de definir las ecuaciones, es importante relacionar las variables con la nomenclatura en el código computacional:

- Superficie de la pared en contacto con el vapor: A_v .
- Superficie de la pared en contacto con el vapor: A_L .
- Superficie de contacto líquido-vapor: $A_{L/v}$.
- Espesor del tanque: S_s .
- Longitud del tanque: $leng$.

La superficie interior en contacto con el líquido:

$$A_{L_int} = L \cdot 2R_i \cdot \arccos\left(\frac{R_i - L0}{R_i}\right) \quad (ec. 47)$$

La superficie interior en contacto con el vapor:

$$A_{V_int} = L \cdot 2\pi R_i - A_{L_int} \quad (ec. 48)$$

Y, substituyendo el radio interior, por el exterior se obtienen las áreas exteriores en contacto con el líquido y el vapor, respectivamente:

$$A_{L_ext} = L \cdot 2R_e \cdot \arccos\left(\frac{R_e - L0}{R_e}\right) \quad (ec. 49)$$

$$A_{V_ext} = L \cdot 2\pi R_e - A_{L_ext} \quad (ec. 50)$$

Para el cálculo de la superficie de contacto entre líquido-vapor se utiliza la ecuación 50, teniendo en cuenta que el nivel de llenado ($L0$) disminuirá con el tiempo y el valor de A_{LV} se actualizará iteración tras iteración.

$$ALV = L \cdot 2R_i \cdot \sin\left(\arccos\left(\frac{L0 - R_i}{R_i}\right)\right) \quad (ec. 51)$$

La masa total de cada fluido se obtiene a partir de la superficie de la sección circular del tanque, las cual depende del nivel del tanque ($L0$).

Para el líquido:

$$AL0 = R_i^2 \cdot \left(\arccos\left(\frac{R_i - L0}{R_i}\right) - \sin\left(\arccos\left(\frac{R_i - L0}{R_i}\right)\right) \cdot \left(\frac{R_i - L0}{R_i}\right) \right) \quad (ec. 52)$$

Y para el vapor:

$$AV0 = \pi R_i^2 - AL0 \quad (ec. 53)$$

Anexo C

CÓDIGO COMPUTACIONAL

Definición variables para propiedades:

```
substance=1; %propano
global Pv1 Pv2 Pv3 MW Tc Pc gamma bheta sigma;
[Cd1,Cd2,Cd3,Cd4,Cv1,Cv2,Cv3,Cv4,Cv5,CH1,CH2,CH3,CH4,C1,C2,C3,C4,C5,CkL1,CkL2,CkL3,CuL1,
CuL2,CuL3,CuL4,CuL5,CkV1,CkV2,CkV3,CkV4,CuV1,CuV2,
SurfT1,SurfT2]=substances_parameters(substance);
```

Propiedades físico-termodinámicas:

```
dL=@(y) abs(MW*(Cd1/Cd2^(1+(1-y./Cd3)^Cd4))); % Densidad del líquido
H=@(y) (CH1*(1-y./Tc)^(CH2+CH3*y./Tc+CH4*(y./Tc)^2))/MW; % Calor latente
cPL=@(y) 36309-230.2*y+0.3941*y^2; % Capacidad calorífica líquido
cpV=@(y) (Cv1+Cv2*(Cv3/y/sinh(Cv3/y))^2+Cv4*(Cv5/y/cosh(Cv5/y)))/(gamma*MW); % Capacidad
% calorífica del vapor a volumen constante
kL=@(T) CkL1+CkL2*T+CkL3*T^2; % Conductividad térmica del líquido
uL=@(T) exp(CuL1+CuL2/T+CuL3*log(T)+CuL4*T^CuL5); % Viscosidad del líquido
kV=@(T) CkV1*T^CkV2/(1+CkV3/T+CkV4/T^2); % Conductividad térmica del vapor
uV=@(T) CuV1*T^CuV2; % Viscosidad térmica del vapor
SurfTens=@(T) SurfT1*(1-T/Tc)^SurfT2; % Tensión superficial
sigma=5.67e-8; % Constante Sthefan Boltzman [W/m2K4]

global cpL0 cpV0 dL0 dV0 H0 uL0 kL0 kV0 uV0 SurfTens0;
global Di Ri P_open P_close Apsv leng epsilon;
```

Lectura variables de entrada, archivo .txt

```
input=fscanf(fopen('VER_3_3.txt'),'%f');
```

Presión y temperatura inicial:

```
Pin=input(23); %Presión inicial [bar]
Pin=Pin*10^5;
Tin=273.15-Pv3+Pv2/(Pv1+5-log10(Pin)); %Temperatura inicial [K]
```

Inicialización propiedades:

```
H0=H(Tin);
cpl0=cpl(Tin);
cpv0=cpv(Tin);
dL0=dL(Tin);
dV0=dV(Pin,Tin);
kL0=kL(Tin);
uL0=uL(Tin);
kV0=kV(Tin);
uV0=uV(Tin);
SurfTens0=SurfTens(Tin);
```

PROPIEDADES TANQUE

Geometria

```
st=input(3)/1000; % Espesor (mm)
jt=input(3)/1000; % Espesor (mm)

Ss=st+jt;          %Espesor total del tanque

leng=input(1);      % Longitud (m)
Di=input(2);        % Diametro interior (m)
Ri=Di/2;            % Radio interior (m)
De=Di+2*(Ss);       % Diametro exterior capa (m)
Re=De/2;            % Radio exterior (m)
```

Propiedades material tanque:

```
ds=input(7);        % Densidad material tanque
cps=input(8);       % Capacidad calorifica sólido
ks=input(9);        % Conductividad térmica sólido
Rp0=input(10);      % Estres (MPa)
epsilon=0.9;        % Emisividad tanque
eps_j=epsilon;
```

Cálculo nivel tanque (m) a partir nivel de llenado (%):

```
syms Li
```

```
Filling_degree=input(4)/100;
L0=vpasolve(acos((Ri-Li)/Ri)-sin(acos((Ri-Li)/Ri))*((Ri-Li)/Ri)==pi*Filling_degree,Li);
L0=double(L0); % Nivel del líquido (m)
```

Propiedades PRV:

```
P_open=input(13)*1e5; % Presión de seguridad PRV
P_close=input(14)*1e5; % Presión para volver a cerrar PRV
Apsv=input(12)*1e-4; % Área PRV
Fi=0; % Flujo másico PRV
Fi_old=0; % Flujo másico en la iteración
% anterior, es necesario para que el programa identifique si la PRV está abierta o no
Fw_L=sin(acos(abs(L0-Ri)/Ri))/acos((L0-Ri)/Ri); % Factor vista pared-líquido
```

Definición de áreas:

```
global A1_5int0; global A2_6int0;
A1_5int0=leng*2*Ri*acos((Ri-L0)/Ri); % AL_int
A2_6int0=leng*2*pi*Ri-A1_5int0; % AV_int
A1_5ext0=leng*2*Re*acos((Re-L0)/Re); % AL_ext
A2_6ext0=leng*2*pi*Re-A1_5ext0; % AV_ext
A1_5av0=(A1_5int0+A1_5ext0)/2; %
A2_6av0=(A2_6int0+A2_6ext0)/2; %
AL0=Ri^2*((acos((Ri-L0)/Ri))-sin(acos((Ri-L0)/Ri))*((Ri-L0)/Ri)); % Superficie sección
% circular líquido
AV0=pi*Ri^2-AL0; % Superficie sección circular vapor
ALV=@(L) leng*Di*sin(acos(abs(L-Ri)/Ri)); % Superficie interfaz líquido-vapor
```

Parametros para la inicializacion: tiempo 0s.

```
TL(1)=Tin; % Temperatura líquido
TV(1)=Tin; % Temperatura vapor
mL(1)=dL0*AL0*leng; % Masa total líquido
mV(1)=leng*AV0*Pin*Mw/(8314*Tin); % Masa total vapor
L(1)=L0; % Nivel tanque
P(1)=Pin; % Presión
T2_6(1)=Tin; % Tsv
T1_5(1)=Tin; % Tsl
TiV(1)=Tin; % Tssv
TiL(1)=Tin; % Tssl
m0=mL(1)+mV(1);
massloss(1)=0;
Pvap(1)=10^(Pv1-(Pv2/(Tin-273.15+Pv3)))*10^5;
```

Definición de caudales térmicos:

```
qLV=@(Tv, Tl,L,hLV) hLV*ALV(L)*(Tv-Tl); % Caudal térmico líquido-vapor
qL=@(TL,T1_5,T2_6,hL,Fw_L,A1,A2) (hL*(A1*(T1_5-TL)))+(sigma*(T2_6^4-TL^4)/(1/A2/Fw_L+
(1-epsilon)/A2/epsilon)); %Caudal de calor de la pared al al líquido + calor
% por radiación de la pared del vapor
qV=@(Tv,T2_6,hV,A2) hV*A2*(T2_6-Tv); % Caudal de calor de la pared al vapor
Irr=@(Tw) (100000); %qin: Flujo incidente /// ((sigma*eps_j*(eps_f*Tf^4+(1-eps_f)*Tamb^4)
% -(sigma*eps_j*Tw^4))*Fvf_n+(1-Fvf_n)*sigma*eps_j*Tamb^4); % Calor incidente
% //Futuros trabajos
```

Definición iteraciones y tiempo computacional:

```
time(1)=0;
tic
i=1;
niter=input(27); % Num. iteraciones
tspan=[0 input(26)]; % dt
```

Definición coeficientes de convección

```
% Necesario conocer el valor anterior para:

Fi_old=Fi;
Fi=PSV(TV(i),P(i),Fi_old,PRVb);
hLV=hLiqVap(TL(i),TV(i),L(i));
[hL,film]=hLi(P(i),T1_5(i),TL(i));
[hV,hVrad]=hVap(TV(i),T2_6(i),Fi,L(i));
% Definicion variables para luego poder estudiarlas en función del tiempo:
Pvap(i+1)=10^(Pv1-(Pv2/(TL(i)-273.15+Pv3)))*10^5;
qVL(i+1)=hLV*ALV(L(i))*(TV(i)-TL(i));
ql(i+1)=hL*(A1_5int0*(T1_5(i)-TL(i)));
qrad(i+1)=(sigma*(T2_6(i)^4-TL(i)^4)/(1/A2_6int0/Fw_L+(1-epsilon)/A2_6int0/epsilon));
qv(i+1)= hV*A2_6int0*(T2_6(i)-TV(i));
cpv(i+1)=cpV(i);
cpl(i+1)=cpL(i);
kl(i+1)=kL(i);
ul(i+1)=uL(i);
kv(i+1)=kV(i);
uv(i+1)=uV(i);
dl(i+1)=dL(i);

fi(i+1)=Fi;
```

SISTEMA ECUACIONES

```

if P(i)>10^(Pv1-(Pv2/(TL(i)-273.15+Pv3)))*10^5 % Caso no ebullición
líquido f=@(t,x) [
    (qL(x(1),x(8),x(7),hL,Fw_L,A1_5int0,A2_6int0)+qLV(x(2),x(1),x(4),hLV))/(x(5)*cpL0
    );
    %-
    >T
    L
    (qV(x(2),x(7),hV,A2_6int0)-qLV(x(2),x(1),x(4),hLV)-Fi*8314*x(2)/MW)/(x(6)*cpV0);
    %-
    >T
    V
    ((dV0*8314/MW)*(qV(x(2),x(7),hV,A2_6int0)-qLV(x(2),x(1),x(4),hLV)
    -Fi*8314*x(2)/MW)/(x(6)*cpV0)-Fi*dV0*8314*x(2)/(x(6)*MW)); %-
    >P 0; %->L
    0; %->mL
    -Fi; %->mV
    (2/(ds*cps*st*(A2_6av0+A2_6int0)/2))*(A2_6av0*(ks/Ss)*(x(9)-x(7))-
    A2_6int0*(hV*(x(7)-x(2))+sigma*epsilon*Fw_L*((x(7)^4-x(1)^4)))); %-
    >T2_6
    (2/(ds*cps*st*(A1_5av0+A1_5int0)/2))*(A1_5av0*(ks/Ss)*(x(10)-
    x(8))-
    A1_5int0*hL*(x(8)-x(1))); %->T1_5
    (2/(ds*cps*jt*(A2_6av0+A2_6ext0)/2))*(A2_6ext0*(1-HeatS)*(hf*(Tf-
    x(9))+
    sigma*epsilon*(Tf^4-x(9)^4))+A2_6ext0*HeatS*(Irr(x(9))+haiV*(x(9)-
    Tamb)- sigma*epsilon*(x(9)^4-Tamb^4))-A2_6av0*(ks/Ss)*(x(9)-x(7)));
    %TiV
    (2/(ds*cps*jt*(A1_5av0+A1_5ext0)/2))*(A1_5ext0*(1-HeatS)*(hf*(Tf-
    x(10))+ sigma*epsilon*(Tf^4-
    x(10)^4))+A1_5ext0*HeatS*(Irr(x(10))+haiL*(x(10)-Tamb)-
    sigma*epsilon*(x(10)^4-Tamb^4))-A1_5av0*(ks/Ss)*(x(10)-x(8))); %TiL
    ];
gio(i)=1;
else % Caso ebullición líquido
f=@(t,x) [
    0; % ec.1
    (1/(x(6)*cpV0))*(qV(x(2),x(7),hV,A2_6int0)-qLV(x(2),x(1),x(4),hLV)-
    ((qL(x(1),x(8),x(7),hL,Fw_L,A1_5int0,A2_6int0)+qLV(x(2),x(1),x(4),hLV))/H0)
    *(cpV0*(x(2)-x(1))-8314*x(1)/MW)-Fi*8314*x(2)/MW); % ec.2
    ((dV0/x(6))*((x(3)/dL0)*(-(qL(x(1),x(8),x(7),hL,Fw_L,A1_5int0,A2_6int0)
    +qLV(x(2),x(1),x(4),hLV))/H0)+(8314*x(2)/MW)*((qL(x(1),x(8),x(7),hL,Fw_L,A1_5int0,
    A2_6int0)+qLV(x(2),x(1),x(4),hLV))/H0-Fi)+(8314*x(6)/MW)*((1/(x(6)*cpV0))*
    (qV(x(2),x(7),hV,A2_6int0)-qLV(x(2),x(1),x(4),hLV)-
    ((qL(x(1),x(8),x(7),hL,Fw_L,A1_5int0,A2_6int0)+qLV(x(2),x(1),x(4),hLV))/H0)*
    (cpV0*(x(2)-x(1))-8314*x(1)/MW)-Fi*8314*x(2)/MW)))); %ec.3
    -(((qL(x(1),x(8),x(7),hL,Fw_L,A1_5int0,A2_6int0)+qLV(x(2),x(1),x(4),hLV))/H0)/
    (2*dL0*leng*sqrt(Ri^2-(Ri-x(4))^2))); % ec.4
    -(qL(x(1),x(8),x(7),hL,Fw_L,A1_5int0,A2_6int0)+qLV(x(2),x(1),x(4),hLV))/H0;%ec.5
    (qL(x(1),x(8),x(7),hL,Fw_L,A1_5int0,A2_6int0)+qLV(x(2),x(1),x(4),hLV))/H0-
    Fi;%ec.6
    (2/(ds*cps*st*(A2_6av0+A2_6int0)/2))*(A2_6av0*(ks/Ss)*(x(9)-x(7))-
    A2_6int0*(hV*(x(7)-x(2))+sigma*epsilon*Fw_L*((x(7)^4-x(1)^4)))); % ec.7
    (2/(ds*cps*st*(A1_5av0+A1_5int0)/2))*(A1_5av0*(ks/Ss)*(x(10)-
    x(8)))-

```

```

        (2/(ds*cps*jt*(A1_5av0+A1_5ext0)/2))*(A1_5ext0*(1-HeatS)*(hf*(Tf-x(10))
+sigma*epsilon*(Tf^4-x(10)^4))+A1_5ext0*HeatS*(Irr(x(10))+hail*(x(10)-Tamb)-
sigma*epsilon*(x(10)^4-Tamb^4))-A1_5av0*(ks/Ss)*(x(10)-x(8))); % ec.10
    ];
    gio(i)=2;
end

T0=[TL(i) TV(i) P(i) L(i) mL(i) mV(i) T2_6(i) T1_5(i) TiV(i) TiL(i)];

[t,S]=ode45(f,tspan,T0);

```

Resultados

```

TL(i+1)=S(length(t),1);
TV(i+1)=S(length(t),2);
P(i+1)=S(length(t),3);
L(i+1)=S(length(t),4);
mL(i+1)=S(length(t),5);
mV(i+1)=S(length(t),6);
T2_6(i+1)=S(length(t),7);
T1_5(i+1)=S(length(t),8);
TiV(i+1)=S(length(t),9);
TiL(i+1)=S(length(t),10);
time(i+1)=time(i)+t(length(t));
massloss(i+1)=m0-mL(i+1)-mV(i+1);

% Actualización parámetros para sistema de ecuaciones:
H0=H(TL(i+1));
cpL0=cpL(TL(i+1));
cpV0=cpV(TV(i+1));
dV0=dV(P(i+1),TV(i+1));
dL0=dL(TL(i+1));
kL0=kL(TL(i+1));
uL0=uL(TL(i+1));
kV0=kV(TV(i+1));
uV0=uV(TV(i+1));
SurfTens0=SurfTens(TL(i+1));
A1_5int0=leng*2*Ri*acos((Ri-L(i+1))/Ri);
A2_6int0=leng*2*pi*Ri-A1_5int0;
A1_5ext0=leng*2*Re*acos((Re-L(i+1))/Re);
A2_6ext0=leng*2*pi*Re-A1_5ext0;
A1_5av0=(A1_5int0+A1_5ext0)/2;
A2_6av0=(A2_6int0+A2_6ext0)/2;
Fw_L=sin(acos(abs(L(i+1)-Ri)/Ri))/acos((L(i+1)-Ri)/Ri);

```

AVISOS

```

if L(i)<.01 %no more liquid block
    disp('almost no more liquid inside')
    niter=1;
end

if Fi>0 && Fi_old==0
    t_op_PRV=time(i);
    fprintf('opening time for the PRV=%d s \n',round(t_op_PRV))

end
i=i+1;

```

POSTPROCERSSING

```

% Variables:

TiL=TiL-273.15; %K-> ?C
TiV=TiV-273.15;%K-> ?C
TL=TL-273.15;%K-> ?C
TV=TV-273.15;%K-> ?C
T1_5=T1_5-273.15;%K-> ?C
T2_6=T2_6-273.15;%K-> ?C
P=P/1e5; %Pa->bar
Pvap=Pvap/1e5;

% Graficos:

figure
plot(time(:),TL(:),'b',time(:),TV(:),'r');
legend('Temperatura liquido','Temperatura vapor');
xlabel('t(s)');
ylabel('T(°C)');

figure
plot(time(:),P(:),time(:),Pvap(:),'g');
legend('Presion','Presion de vapor');
xlabel('t(s)');
ylabel('P(bar)');

figure
plot(time(:),qVL(:),'g',time(:),ql(:),'b',time(:),qv(:),'r',time(:),qrad(:),'y');
legend('qLV','qL','qV','qrad');
xlabel('t(s)');
ylabel('Q(W)');

figure
plot(time(:),L(:));
legend('Nivel');
xlabel('t(s)');

```



```

    ylabel('L(m)');
figure
    plot(time(:),mL(:));
    legend('Masa liquido');
    xlabel('t(s)');
    ylabel('mL(kg)');
figure
    plot(time(:),mV(:),time(:),fi(:));
    legend('vapour mass','Flux PRV');
    xlabel('t(s)');
    ylabel('mV(kg)','mPRV (kg)');
figure
    plot(time(:),cpv(:),time(:),kv(:),time(:),kl(:));
    legend('CpV','kV','kL');
    xlabel('t(s)');
    ylabel('Propiedades')
figure
    plot(time(:),Tl_5(:),time(:),T2_6(:),time(:),Til(:),time(:),Tiv(:));
    legend('Temperatura pared interior en contacto con el líquido',
'Temperatura pared interior en contacto con el vapor',['Temperatura pared exterior' ...
'en contacto con el líquido'],'Temperatura pared exterior en contacto con el vapor');
    xlabel('t(s)');
    ylabel('T(°C)');

```

Traspaso datos a EXCEL:

```

t={'Time','TL','TV','P','mL','mV','Tsv','Tsl','Tssv','Tssl'};
xlswrite('RESULTS.xls',t,'results','A1')
xlswrite('RESULTS.xls',time(:),'results','A2')
xlswrite('RESULTS.xls',TL(:),'results','B2')
xlswrite('RESULTS.xls',TV(:),'results','C2')
xlswrite('RESULTS.xls',P(:),'results','D2')
xlswrite('RESULTS.xls',mL(:),'results','E2')
xlswrite('RESULTS.xls',mV(:),'results','F2')
xlswrite('RESULTS.xls',T2_6(:),'results','G2')
xlswrite('RESULTS.xls',Tl_5(:),'results','H2')
xlswrite('RESULTS.xls',Tiv(:),'results','I2')
xlswrite('RESULTS.xls',Til(:),'results','J2')

```